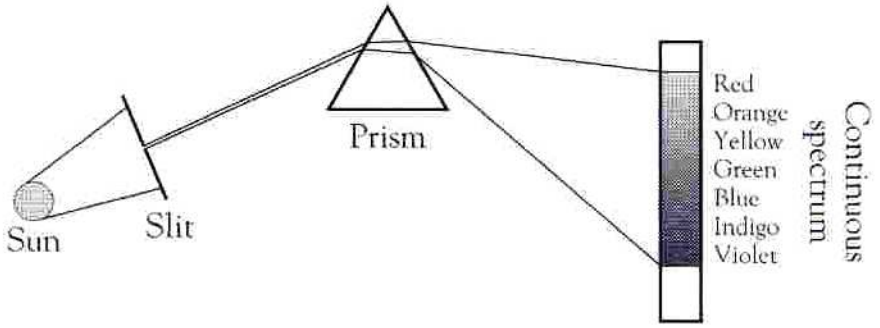
១
ការរំលឹកពីទំរង់អេឡិចត្រុងនៃអាតូម
(Review of the Electronic Structure of the Atom)

ដើម្បីយល់ពីលក្ខណៈនៃសមាសធាតុអសរីរាង្គយើងត្រូវសិក្សាពីលក្ខណៈនៃសម្ព័ន្ធគីមី។ ចំពោះសម្ព័ន្ធគឺវាទាក់ទងទៅនឹងលក្ខណៈអេឡិចត្រុងនៃអាតូមដែលចូលផ្សំ។ ដូច្នេះការសិក្សាពីគីមីអសរីរាង្គចាប់ផ្តើមជាមួយនឹងការរំលឹកពីគំរូប្រូបាប៊ីលីតេនៃអាតូម និងការពិនិត្យលើការអនុវត្តគំរូរូបសណ្ឋានអេឡិចត្រុងនៃអាតូមនិងអ៊ីយ៉ុង។

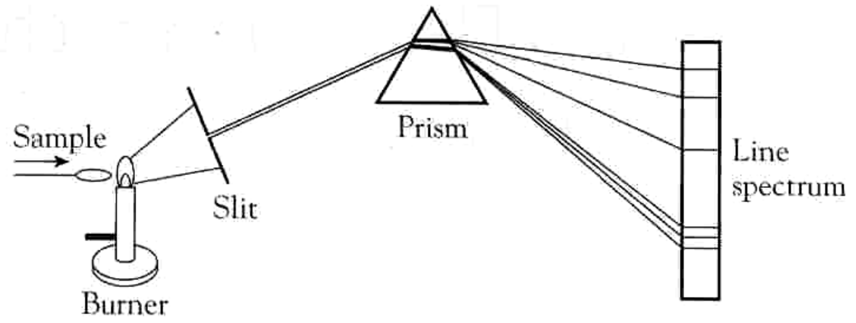
វាជាការគួរឱ្យភ្ញាក់ផ្អើលដែលលោក Isaac Newton បានរកឃើញនូវអ្វីៗទាំងអស់ព្រោះថាគាត់ជាសាស្ត្រាចារ្យ ដែលមានការភ្លេចភ្លាំងច្រើន។ គាត់តែងតែវាស់ពេលស្ងោរស៊ុត ដែលគាត់ញ៉ាំសម្រាប់អាហារពេលព្រឹក។ ព្រឹកមួយអ្នកបំរើបានឃើញគាត់ឈរក្បែរឆ្នាំងទឹកពុះដោយមានកាន់ស៊ុតមួយក្នុងដៃរបស់គាត់ ហើយសំឡឹងមើលមិនដាក់ភ្នែកទៅលើនាឡិកាដៃរបស់គាត់ ដែលនៅខាងក្រោមឆ្នាំងដាំទឹកនោះ! ទោះបីជាយ៉ាងណាក៏ដោយគាត់បានធ្វើការចាប់ផ្តើមសិក្សាទំរង់អេឡិចត្រុងនៃអាតូមប្រហែលជានៅឆ្នាំ 1700 នៅពេលដែលគាត់បានកត់សម្គាល់ឃើញការឆ្លងកាត់នៃពន្លឺព្រះអាទិត្យកាត់តាមព្រីសបានបង្កើតនូវស្ប៉ិចជាប់ដែលអាចមើលឃើញ។(រូបទី1.1)



រូប1.1 ព្រីសមួយបំបែកពន្លឺពណ៌សនៅជំហានរលកនៃស្ប៉ិចតំបន់មើលឃើញ

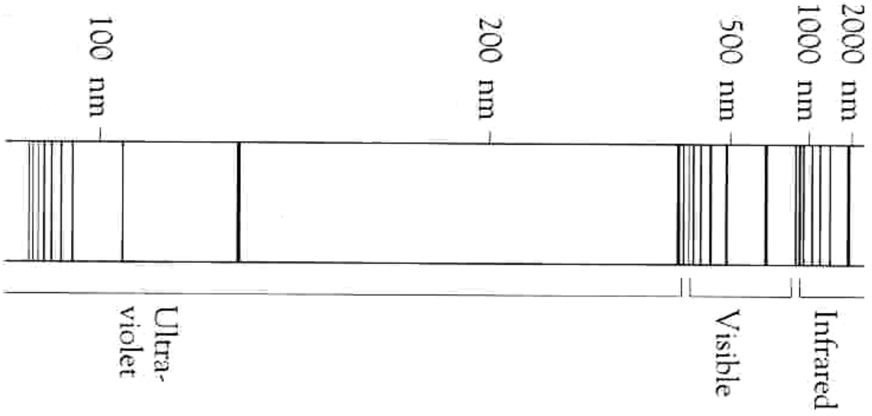
ក្រោយមកទៀតនៅឆ្នាំ1860លោក Robert Bunsen (ល្បីល្បាញពីចំពុះប៊ុនសិន) បានធ្វើការអង្កេតការបញ្ចេញពន្លឺពីអណ្តាតភ្លើងនិងឧស្ម័ន។ លោកប៊ុនសិនបានអង្កេតមើលថា ស្ប៉ិចដែលបានបញ្ចេញជាស៊េរីនៃបន្ទាត់មានពណ៌ ស្ប៉ិចមិនជាប់(គេហៅថាស្ប៉ិចបន្ទាត់)។ គាត់បានបញ្ជាក់ថា ធាតុគីមីនីមួយៗបានបង្កើតស្ប៉ិចដែលមានលក្ខណៈយថាប្រភេទ (រូប1.2)។ ក្រោយមកអ្នកធ្វើការអង្កេតផ្សេងទៀតបានបង្ហាញថាការពិតមានក្រុមបន្ទាត់ស្ប៉ិចបីបួនរបស់អាតូមអ៊ីដ្រូសែន ដែលក្នុងនោះក្រុមស្ប៉ិចមួយ

ស្ថិតនៅតំបនស្វាយអ៊ុលត្រា មួយស្ថិតក្នុងតំបន់មើលឃើញ ហើយបន្ទាត់ស្ប៉ិចជាច្រើនទៀតស្ថិតនៅផ្នែកនៃតំបន់អាំងហ្រ្វាក្រហមនៃស្ប៉ិចអេឡិចត្រូម៉ាញេទិច (រូប 1.3) ។



រូប1.2 ស្ប៉ិចបន្ទាត់ត្រូវបានបង្កើតពេលដែលធាតុមួយត្រូវបានដុតកម្តៅជាមួយអណ្តាតភ្លើង

ការពន្យល់ពីស្ប៉ិចបន្ទាត់ជាជោគជ័យមួយក្នុងចំណោមស្នាដៃទាំងឡាយនៃ**គំរូអាតូមបរ** ។ នៅឆ្នាំ 1913 លោក Niels Bohr បានស្នើឡើងថាអេឡិចត្រុងអាចទទួលតែគន្លងថាមពលកំណត់ ដែលត្រូវគ្នានឹងគន្លងរាងមូលផ្សេងៗជុំវិញណ្វៃយ៉ូ ។



រូប 1.3 ស្ប៉ិចបញ្ចេញអ៊ីដ្រូសែន

គាត់បានកំណត់គន្លងថាមពលទាំងនេះជាមួយនឹងតម្លៃលេខគត់ដែលគាត់ហៅថា**ចំនួនកង់ទិច** (quantum number) ។ តម្លៃនៃប៉ារ៉ាម៉ែតនេះអាចមានពី 1 ដល់ ∞ (អានន្ត) ។ គាត់វែកញែកថា នៅពេលថាមពលត្រូវបានស្រូបដោយអាតូមពីអណ្តាតភ្លើង ឬតាមកម្លាំងអគ្គិសនី អេឡិចត្រុងបានផ្លាស់ទីពីគន្លងកង់ទិចមួយទៅគន្លងថាមពលមួយឬច្រើនទៀតដែលខ្ពស់ជាង ។ ក្រោយមកអេឡិចត្រុងបានត្រឡប់មកគន្លងកង់ទិចដែលទាបវិញ ហើយស្ថិតនៅជិតជាងណ្វៃយ៉ូដែរ ពេលនោះពន្លឺត្រូវបានបញ្ចេញ ។ ជំហានរលកនៃពន្លឺដែលបានបញ្ចេញ គឺទាក់ទងច្បាស់ទៅនឹងថាមពលនៃការខុសគ្នាគន្លងកង់ទិចដើម និងបញ្ចប់ ។ នៅពេលដែលអេឡិចត្រុងទទួលយកគន្លងថាមពលទាបបំផុតដែលអាចមាន វាត្រូវបានគេនិយាយថា ស្ថិតនៅ

ក្នុង**សណ្ឋានគ្រឹះ**។ ប្រសិនបើអេឡិចត្រុងមួយឬច្រើនស្រូបនូវថាមពលគ្រប់គ្រាន់ដើម្បីផ្លាស់ទីឆ្ងាយពីណ្វៃយ៉ូនោះវាត្រូវបានគេនិយាយថាស្ថិតក្នុង**សណ្ឋានរំភើប**។

ថាមពលនៃអេឡិចត្រុងនៅក្នុងគន្លងនីមួយៗអាចត្រូវបានរកឃើញតាមទំនាក់ទំនង:

$$E = -R_H\left(\frac{1}{n^2}\right)$$

ដែល E ជាថាមពលអេឡិចត្រុង n ជាចំនួនកង់ទិច ហើយ R_H ជាថេរ Rydberg សម្រាប់អ៊ីដ្រូសែន។ ថាមពលនៃពន្លឺដែលបានបញ្ចេញអាចត្រូវបានគេគណនាចេញពីភាពខុសគ្នានៃគន្លងថាមពលដើមនិងបញ្ចប់។ ជំហានរលកនៃពន្លឺអាចត្រូវបានរកឃើញពីទំនាក់ទំនង $E = h\nu$ និង $c = \lambda\nu$ ដែល h ជាថេរប្លង់ (Planck's constant) ν ជាប្រេកង់ c ជាល្បឿនពន្លឺ ហើយ λ ជាជំហានរលកនៃពន្លឺ ដែលបានបញ្ចេញ។

ប៉ុន្តែ គំរូអាតូមបរមានកំហុសមួយចំនួន។ ឧទាហរណ៍ ស្ប៉ិចនៃអាតូម ដែលមានអេឡិចត្រុងច្រើន មានបន្ទាត់ច្រើនជាងបានទស្សន៍ទាយទុកដោយគំរូអាតូមបរ។ គំរូអាតូមបរក៏មិនអាចពន្យល់ពីការបំបែកនៃស្ប៉ិចបន្ទាត់ក្នុងដែនម៉ាញេទិច (បាតុភូតដែលត្រូវបានគេស្គាល់ថាជា **ផល Zeeman**)។ ក្នុងរយៈពេលដ៏ខ្លី គេត្រូវបានស្នើឡើងគំរូផ្សេងៗខុសៗគ្នាគឺគំរូមេកានិចកង់ទិច ដើម្បីពន្យល់ការអង្កេតទាំងនេះ។

ស្ប៉ិចស្រូបអាតូម

វត្ថុមួយ ដែលមានពន្លឺចេញដូចជាព្រះអាទិត្យត្រូវបានគេសង្ឃឹមថានឹងបញ្ចេញស្ប៉ិចជាប់មួយនៃកាំរស្មីអេឡិចត្រូម៉ាញេទិច។ ប៉ុន្តែនៅដើមសតវត្សទី19 អ្នកវិទ្យាសាស្ត្រជនជាតិអាឡឺម៉ង់ម្នាក់គឺលោក Josef von Fraunhofer បានបញ្ជាក់ថាស្ប៉ិចដែលអាចមើលឃើញពីព្រះអាទិត្យពិតជាមានបង់ពណ៌ខ្មៅមួយចំនួន។ ក្រោយមកទៀតអ្នកអង្កេតបានយល់ថាបង់ទាំងនោះជាលទ្ធផលនៃស្រូបនៅជំហានរលកណាមួយ ដោយអាតូមដែលមានភាពត្រជាក់ នៅក្នុងបរិយាកាសស្ថិតនៅខាងលើផ្ទៃព្រះអាទិត្យ។ អេឡិចត្រុងនៃអាតូមទាំងនេះគឺស្ថិតនៅក្នុងសណ្ឋានគ្រឹះ ហើយវាស្រូបកាំរស្មីនៅជំហានរលក ត្រូវគ្នាទៅនឹងថាមពល ដែលត្រូវការដើម្បីរំភើបទៅសណ្ឋានថាមពលខ្ពស់ជាង។ ការសិក្សាលើស្ប៉ិចទាំងនេះនាំទៅរកការរកឃើញធាតុអេល្យូម។ ការសិក្សាស្ប៉ិចទាំងនេះនៅតែមានសារៈសំខាន់យ៉ាងធំធេងក្នុង Cosmochemistry ដែលជាការសិក្សាសមាសភាពគីមីនៃផ្កាយ។

នៅឆ្នាំ1955 អ្នកវិទ្យាសាស្ត្រពីរក្រុម មួយក្រុមនៅប្រទេសអូស្ត្រាលី ហើយមួយក្រុមទៀតនៅហូឡង់បានយលថាវិធីសាស្ត្រស្រូបអាចប្រើដើម្បីមើលវត្តមាននៃធាតុនៅកំហាប់ទាបខ្លាំង។ ធាតុ

នីមួយៗមានស្ប៊ិចសំរូបដោយឡែក ដែលយោងទៅតាមភាពខុសគ្នាផ្សេងៗរវាងកំរិតថាមពលក្នុងអាតូមរបស់វា។ នៅពេលពន្លឺដែលចេញពីប្រភពថាមពលត្រូវបានឆ្លងកាត់ចំហាយនៃភាគសំណាកនៃធាតុជំហានរលកណាមួយដែលត្រូវនឹងភាពខុសគ្នាថាមពលក្នុងអាតូមនឹងត្រូវបានស្រូប។ យើងឃើញថាកាលណាកំហាប់អាតូមកាន់តែខ្ពស់ នេះសមាមាត្រពន្លឺដែលត្រូវស្រូបក៏កាន់តែធំ។ ទំនាក់ទំនងលីនេអ៊ែរវាងសំរូបពន្លឺនឹងកំហាប់នេះត្រូវបានគេស្គាល់ថាជាច្បាប់ Beer។ ភាពរួសនៃវិធីសាស្ត្រនេះពិតជាខ្ពស់ហើយកំហាប់ផ្នែកក្នុងមួយលាន(ppm) គឺងាយស្រួលក្នុងការកំណត់ ធាតុខ្លះអាចត្រូវបានរកឃើញនៅកំហាប់ផ្នែកក្នុងមួយកោដិ(ppb)។ ស្ប៊ិចសំរូបអាតូម ឥលូវបានក្លាយជាឧបករណ៍វិភាគជាប្រចាំនៅក្នុងគីមីវិទ្យា. លោហៈវិទ្យា. ធរណីវិទ្យា. ឱសថវិទ្យា. វិទ្យាសាស្ត្រនិតិក្រម ហើយនឹងមុខវិទ្យាវិទ្យាសាស្ត្រដ៏ទៃទៀតជាច្រើនហើយជាទូទៅវាត្រូវការបម្លាស់ទីនៃអេឡិចត្រុងពីកំរិតថាមពលមួយទៅកំរិតថាមពលមួយទៀត។

១.១ សមីការរលក Schrödinger និងសារៈសំខាន់របស់វា

គំរូមេកានិចកង់ទិចនៃទំរង់អាតូម ដែលស្មុគស្មាញជាង គឺទទួលបានពីកិច្ចការរបស់លោក Louis de Broglie។ លោក De Broglie បានបង្ហាញថា រលកអេឡិចត្រូម៉ាញ៉េទិច អាចគិតដូចជាចរន្តនៃភាគល្អិត (ផូតុង) ហើយភាគល្អិតនោះ ដែលមានចលនាអាចបញ្ចេញលក្ខណៈដូចជារលក។ ដូច្នេះវាជាត្រឹមត្រូវ សម្រាប់ពិពណ៌នាថាអេឡិចត្រុងមានលក្ខណៈជាភាគល្អិតផង និងជារលកផង។ ដោយប្រើប្រាស់លក្ខណៈទ្វេភាពជារលកនិងភាគល្អិតនេះ លោក Erwin Schrödinger បានបង្កើតសមីការឌីផេរ៉ង់ស្យែលដោយផ្នែក ដើម្បីតំណាងលក្ខណៈអេឡិចត្រុងជុំវិញណ្វៃយ៉ូអាតូម។ សមីការនេះ ដែលត្រូវបានផ្តល់ឱ្យនៅក្រោមចំពោះអាតូម ដែលមានមួយអេឡិចត្រុង បានបង្ហាញពីទំនាក់ទំនង រវាងអនុគមន៍រលកនៃអេឡិចត្រុងΨ ថាមពលសរុបនៃប្រព័ន្ធ E និងថាមពលប៉ូតង់ស្យែលនៃប្រព័ន្ធ V។ ឌីផេរ៉ង់ស្យែលលំដាប់ពីរតំណាងឱ្យអនុគមន៍រលកជាមួយនឹងអ័ក្ស x, y, និង z ហើយ m ជាម៉ាស អេឡិចត្រុង និង h ជាថេរប្លង់។

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2}+\frac{8\pi^2 m}{h^2}(E-V)\Psi=0$$

ដេរីវេនៃសមីការនេះនិងរបៀបនៃការដោះស្រាយគឺស្ថិតក្នុងផ្នែករូបវិទ្យានិងគីមីរូប ប៉ុន្តែដំណោះស្រាយរបស់វាមានសារៈសំខាន់ចំពោះអ្នកគីមីវិទ្យា។ យើងគួរចាំក្នុងចិត្តថា សមីការរលកនេះជារូបមន្តគណិតវិទ្យាដ៏ធម្មតា។ ជាធម្មតាយើងភ្ជាប់អត្ថន័យទៅនឹងដំណោះស្រាយព្រោះមនុស្សជាច្រើនត្រូវការ

រូបភាពច្បាស់លាស់ដើម្បីគិតពីបាតុភូតក្នុងអាតូម ។ ប៉ុន្តែ រូបភាពដែលយើងបង្កើតអាចត្រឹមតែស្រដៀងទៅនឹងភាពពិតនៅក្នុងអាតូមដោយស្រពេចស្រពិលប៉ុណ្ណោះ ។

លោកSchödingerបានស្នើថាអត្ថន័យពិតនៃសមីការអាចរកឃើញពីការេនៃអនុគមន៍រលក Ψ^2 ដែលតាងឱ្យប្រូបាប៊ីលីតេនៃការរកឃើញអេឡិចត្រុងនៅចំណុចណាមួយក្នុងតំបន់ជុំវិញណ្វៃយ៉ូ ។ វាមានដំណោះស្រាយជាច្រើនចំពោះអនុគមន៍រលកមួយ ។ ដំណោះស្រាយនីមួយៗពិពណ៌នាពីអរប៊ីតាល់ខុសៗគ្នា ហើយដូច្នេះវាក៏មានរបាយប្រូបាប៊ីលីតេខុសគ្នាសម្រាប់អេឡិចត្រុងក្នុងអរប៊ីតាល់នោះដែរ ។ អរប៊ីតាល់នីមួយៗត្រូវបានកំណត់ដោយចំនួនគត់បី n, l, និង m_l ។ វាដូចនឹងចំនួនគត់ក្នុងគំរូអាតូមបរដែរ គឺថា ចំនួនគត់ទាំងនេះត្រូវបានគេហៅថាចំនួនកង់ទិច ។

បន្ថែមទៅលើចំនួនកង់ទិចទាំងបី ដែលបានពីទ្រឹស្តីដើម ចំនួនកង់ទិចទី4(m_s)ត្រូវបានគេកំណត់ដើម្បីពន្យល់ពីលទ្ធផលនៃការពិសោធចុងក្រោយ ។ នៅក្នុងការពិសោធនេះ វាត្រូវបានរកឃើញថាការដាក់ឱ្យបាច់អាតូមអ៊ីដ្រូសែនឆ្លងកាត់ដែនម៉ាញេទិច បានបណ្តាលឱ្យអាតូមពាក់កណ្តាលត្រូវបានបែរទៅទិសដៅមួយ ហើយពាក់កណ្តាលទៀតទៅតាមទិសដៅផ្ទុយគ្នា។ អ្នកធ្វើការអង្កេតផ្សេងទៀតបានស្នើឡើងថាការសង្កេតឃើញនេះគឺជាលទ្ធផលដែលបង្ហាញស្ពីនអេឡិចត្រុងពីរផ្សេងគ្នា។ អាតូមដែលមានមួយអេឡិចត្រុងជាមួយនឹងស្ពីនមួយត្រូវបែរតាមទិសដៅមួយ ហើយអេឡិចត្រុងដែលមានស្ពីនច្រាសត្រូវបែរទៅទិសដៅផ្ទុយគ្នា ។ ចំនួនកង់ទិចស្ពីននេះត្រូវបានតាងដោយនិមិត្តសញ្ញា m_s ។

តម្លៃនៃចំនួនកង់ទិចដែលអាចមានត្រូវបានកំណត់ដូចខាងក្រោម:

n ជា**ចំនួនកង់ទិចមេ** អាចមានតម្លៃជាចំនួនគត់វិជ្ជមានពី 1 ដល់ អានន្ត ។

l ជា**ចំនួនកង់ទិចម៉ូម៉ង់នៃមុំ** អាចមានតម្លៃជាចំនួនគត់ពី n-1 ដល់ 0 ។

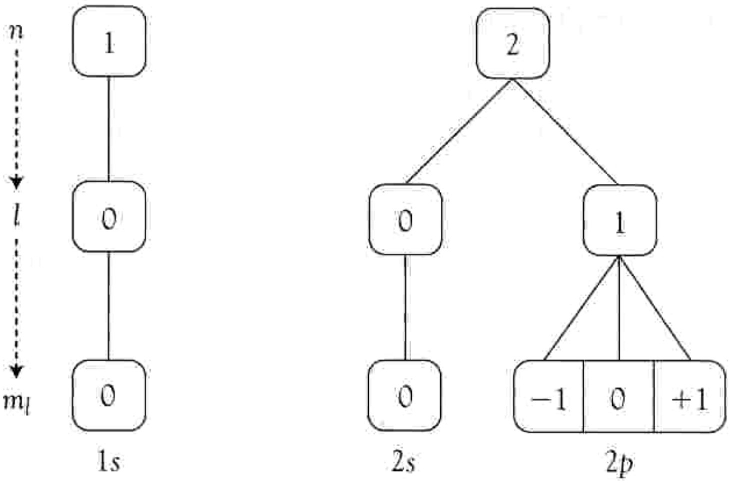
m_l ជា**ចំនួនកង់ទិចម៉ាញេទិច** អាចមានតម្លៃជាចំនួនគត់ពី +1 .0 ទៅ -1 ។

m_s ជា**ចំនួនកង់ទិចស្ពីន** អាចមានតម្លៃ+1/2 និង -1/2 ។

ពេលដែលតម្លៃកង់ទិចមេស្មើ 1 នោះវាមានតែ 1 ក្រុមនៃចំនួនកង់ទិច *n, l*,និង m_l គឺ (1, 0, 0) រៀងគ្នា។ ប៉ុន្តែបើមានចំនួនកង់ទិចមេស្មើ 2 នោះវាមាន 4ក្រុមនៃចំនួនកង់ទិចគឺ (2,0,0; 2,1,-1; 2,1,0; 2,1,+1) ។ ស្ថានភាពនេះត្រូវបានបង្ហាញក្នុងដ្យាក្រាមនៃរូប1.4 ។ ដើម្បីសម្គាល់ពីអរប៊ីតាល់អេឡិចត្រុងដែលត្រូវគ្នាទៅនឹងក្រុមនៃចំនួនកង់ទិចនីមួយៗយើងបានប្រើតម្លៃចំនួនកង់ទិចមេ *n* បន្ទាប់មកជាចំនួនកង់ទិចម៉ូម៉ង់នៃមុំ *l* ។ ដូច្នេះ ពេល *n*=1 វាមានតែអរប៊ីតាល់ 1s ប៉ុណ្ណោះ ។

ពេល n=2 មានអរបីតាល់ 2s មួយនិងអរបីតាល់ 2p បី (ត្រូវទៅនឹងតម្លៃ m_l = +1, 0, -1) ។ អក្សរ s, p, d, និង f គឺទទួលបានពីប្រភេទនៃស្ប៉ិចបន្ទាត់ : sharp, principle, diffuse, និង fundamental ។ ភាពត្រូវគ្នាត្រូវបានបង្ហាញក្នុងតារាង 1.1 ។

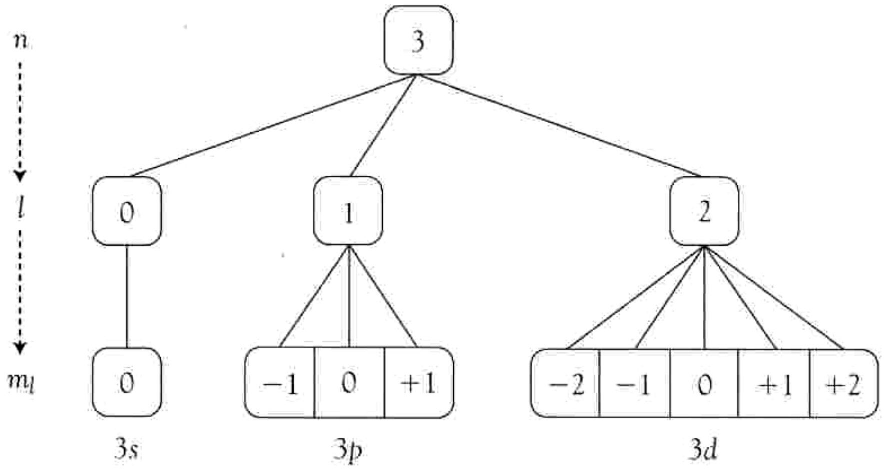
តារាង1.1 ភាពត្រូវគ្នារវាងចំនួនម៉ូម៉ង់នៃមុំ *l* និងការបង្ហាញអរបីតាល់ ។		**តារាង 1.2 ភាពត្រូវគ្នារវាងចំនួនម៉ូម៉ង់នៃមុំ *l* នឹងចំនួនអរបីតាល់**	
តម្លៃ *l*	**អរបីតាល**	**តម្លៃ *l***	**ចំនួនអរបីតាល**
0	*s*	0	1
1	*p*	1	3
2	*d*	2	5
3	*f*	3	7



រូប1.4 ចំនួនកង់ទិចដែលអាចមានចំពោះ n=1 និង n=2 ។

ពេលដែលចំនួនកង់ទិចមេ n = 3 នោះក្រុមនៃចំនួនកង់ទិចមាន 9 (រូប 1.5) ។ ចំនួនកង់ទិចទាំងនេះត្រូវគ្នាទៅនឹងអរបីតាល់ 3s ចំនួនមួយ អរបីតាល់ 3p ចំនួនបី និងអរបីតាល់ 3d ចំនួនប្រាំ។ ដ្យាក្រាមស្រដៀងគ្នានេះសម្រាប់ចំនួនកង់ទិចមេ n = 4 នោះក្រុមនៃចំនួនកង់ទិចមាន 16 ដែលត្រូវគ្នាទៅ នឹងអរបីតាល់ 4s ចំនួនមួយ អរបីតាល់ 4p ចំនួនបី អរបីតាល់ 4d ចំនួនប្រាំ និងអរបីតាល់ 4f ចំនួនប្រាំពីរ (តារាង1.2) ។ តាមទ្រឹស្តីយើងអាចបន្តបែបនេះរហូត ប៉ុន្តែដូចដែលយើងនឹងឃើញ អរបីតាល់ f តាងឱ្យព្រំដែនកំណត់នៃប្រភេទអរបីតាល់ ក្នុងចំណោមធាតុទាំងឡាយនៃតារាងខួបសម្រាប់អាតូម ដែលស្ថិតក្នុងសណ្ឋានគ្រឹះ ។

សមីការរលក Schrödinger ជាទូទៅត្រូវបានបង្ហាញថាជាតំណាងឱ្យអេឡិចត្រុងនៃអាតូមយ៉ាងច្បាស់លាស់ប៉ុន្តែវាមិនមែនទេ។ ដូចដែលយើងពិភាក្សានៅក្នុងជំពូកទី2ផ្នែក2.5ថា សមីការរលក Schrödingerខកខានមិនបានយកចិត្តទុកដាក់នូវការពិតដែលអេឡិចត្រុងខ្លះនៅក្នុងធាត ដែលមានម៉ាសធំធ្វើដំណើរយ៉ាងលឿន។ ជាលទ្ធផលម៉ាសអេឡិចត្រុងត្រូវរងឥទ្ធិពលដោយ**រីឡាទីវីស**(relativity).[1] ថ្វីបើសមីការ Schrödinger អាចត្រូវបានកែប្រែដើម្បីដោះស្រាយបញ្ហានេះ. នៅឆ្នាំ 1928 រូបវិទូជនជាតិអង់គ្លេសគឺលោក P.A.M. Dirac បានអភិវឌ្ឍសមីការរលកប្រសើរមួយ ដែលបញ្ចូលកត្តារីឡាទីវីសទាំងឡាយ។ បើទោះជាចំនួនកង់ទិចមេ n មានសារៈសំខាន់ដូចគ្នាទាំងក្នុងសមីការ Schrödinger និង សមីការ Dirac ក៏ដោយក៏សមីការ Dirac ផ្តល់ឱ្យដោយផ្ទាល់នូវចំនួនកង់ទិចបួន។ សូម្បីតែរូបរាងអរបីតាល់ដែលបានពីសមីការ Dirac និងរូបរាងអរបីតាល់ដែលបានពីសមីការ Schödinger ក៏ខុសគ្នាដែរ។ ប៉ុន្តែដោយសារតែនេះគឺជាអត្ថបទគីមីពណ៌នា ដូច្នេះយើងបញ្ជាក់តែលក្ខណៈអរបីតាល់ងាយធម្មតាដែលបានពីសមីការ Schrödinger ប៉ុណ្ណោះ។



រូប1.5 ចំនួនកង់ទិចដែលអាចមានចំពោះ n=3

១,២ ទ្រង់ទ្រាយអរបីតាល់អាតូម

ការតាងដំណោះស្រាយនៃសមីការរលកលើក្រដាសមិនមែនជាកិច្ចការងាយស្រួលនោះទេ។ ដើម្បីឱ្យមានភាពប្រាកដនិយម យើងបំបែកសមីការរលកជាពីរផ្នែកៈ កាំ និង មុំ។

ចំនួនកង់ទិចនីមួយៗទាំងបីដែលបានពីរសមីការរលកតាងឱ្យរូបភាពផ្សេងៗគ្នានៃអរបីតាល់ៈ

ចំនួនកង់ទិចមេ n បង្ហាញទំហំអរបីតាល់

ចំនួនកង់ទិចម៉ូម៉ង់នៃមុំ l តំណាងទ្រង់ទ្រាយអរបីតាល់

[1] យោងតាមទ្រឹស្តីរីឡាទីវីស នៅពេលរូបធាតុដូចជាភាគល្អិតមានល្បឿនចលនាជិតដល់ល្បឿនពន្លឺ(c) ម៉ាសរបស់វានឹងកើនទៅដល់អនន្ត។

ចំនួនកង់ទិចម៉ាញេទិច m_l តំណាងឱ្យទិសដៅអរបីតាល់

ចំនួនកង់ទិចស្ពីន m_s មានអត្ថន័យតិចតួចគឺវាគ្រាន់តែអនុញ្ញាតឱ្យអេឡិចត្រុងពីរនៅក្នុងអរបីតាល់តែមួយ ។

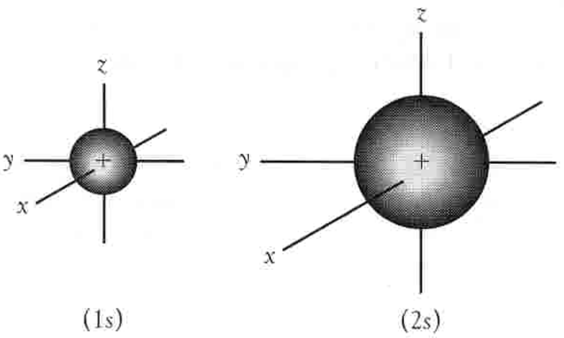
តម្លៃនៃចំនួនកង់ទិចមេ*(n)* និងចំនួនកង់ទិចម៉ូម៉ង់នៃមុំ*(l)* ត្រូវបានកំណត់ថាមពលអេឡិចត្រុង (*l* មានឥទ្ធពលតិចជាង *m*) ។ ទោះបីជាអេឡិចត្រុងមិនធ្វើចលនាវិលតាមអត្ថន័យ“ស្ពីន”ក៏ដោយក៏វាប្រព្រឹត្តទៅដូចជាវាវិល ដែរហើយវាមានលក្ខណៈម៉ាញេទិចដែលត្រូវបានគេសង្ឃឹមថាមានចំពោះភាគល្អិតដែលវិល ។

ដ្យាក្រាមអរបីតាល់ត្រូវបានប្រើ ដើម្បីបង្ហាញពីប្រូបាប៊ីលីតេនៃការរកឃើញអេឡិចត្រុងនៅខណៈណាមួយ ឬកន្លែងណាមួយ ។ ទស្សនៈផ្សេងទៀតគឺ ដើម្បីពិចារណាពីទីតាំងអេឡិចត្រុងក្នុងរយៈពេលដ៏យូរ ។ យើងកំណត់ទីតាំងមួយដែលអេឡិចត្រុងហាក់ដូចជាចំណាយពេលវេលារបស់វាភាគច្រើននៅតំបន់នោះថាជាតំបន់ដែលមាន**ដង់ស៊ីតេអេឡិចត្រុង**ខ្ពស់ (high electron density) ។ ផ្ទុយមកវិញទីតាំង ដែលអេឡិចត្រុងកំរនឹងទៅត្រូវបានគេហៅថាតំបន់ដែលមានដង់ស៊ីតេអេឡិចត្រុងទាប (low electron density) ។

អរបីតាល់ s

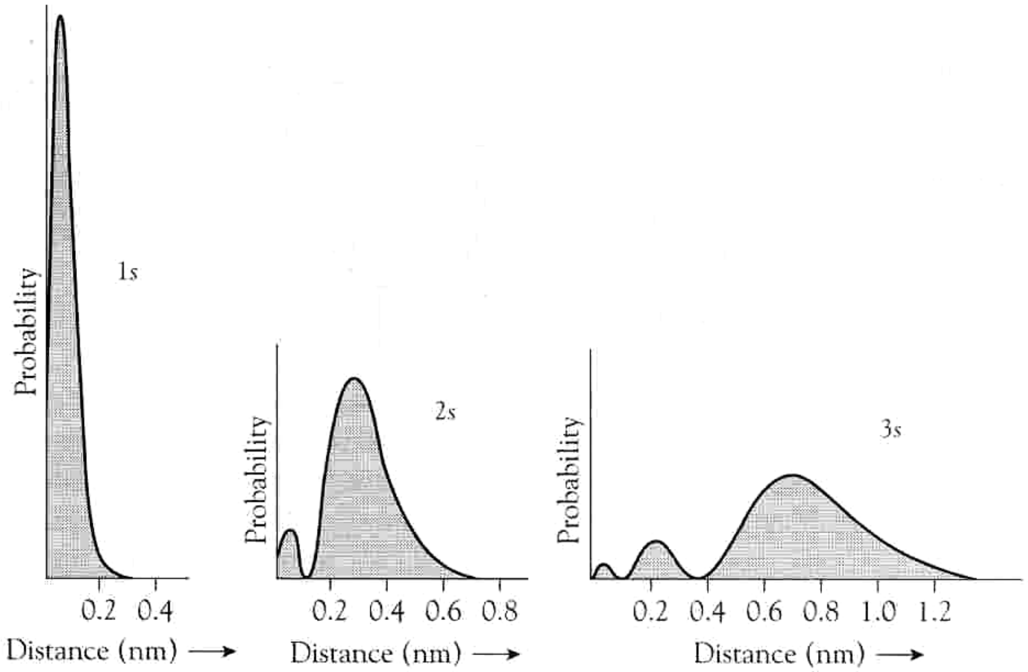
អរបីតាល់ s ជាស្វ៊ែស៊ីមេទ្រីនឹងណ្វៃយ៉ូអាតូម ។ នៅពេលដែលចំនួនកង់ទិចមេកើនឡើងអេឡិចត្រុងមានត្រូវបានគេរកឃើញនៅឆ្ងាយពីណ្វៃយ៉ូ ។ ដើម្បីបញ្ជាក់គំនិតនេះក្នុងមធ្យោបាយផ្សេងទៀតយើងនិយាយថា នៅពេលចំនួនកង់ទិចមេកើនឡើង អរបីតាល់កាន់តែបន្សាយ ។ លក្ខណៈពិសេសតែមួយនៃអេឡិចត្រុងក្នុងអរបីតាល់ s គឺថាវាមានប្រូបាប៊ីលីតេនៃការរកឃើញអេឡិចត្រុង មានកំណត់នៅក្បែរ ឬនៅក្នុងណ្វៃយ៉ូតែម្តង ។ ការជ្រៀតចូលដោយអេឡិចត្រុងក្នុងអរបីតាល់ s នេះដើរតួនាទីយ៉ាងសំខាន់ក្នុងកាំអាតូម (មើលជំពូកទី 2) និងការសិក្សាពីទំរង់អាតូម ។ បច្ចេកទេសនៃ Mossbauer spectoscopy ទាក់ទងនឹងការសិក្សាឥទ្ធិពលនៃបម្លាស់ប្តូរក្នុងដង់ស៊ីតេអរបីតាល់ s លើថាមពលនុយក្លេអ៊ែ ។

តំណាងនៃទំរង់ (អនុគមន៍មុំ) អរបីតាល់ 1s និង 2s នៃអាតូមត្រូវបានប្រៀបធៀបក្នុងរូប 1.6 ។ មាឌអរបីតាល់ 2s ធំជាងមាឌអរបីតាល់ 1s បួនដង ។ នៅក្នុងករណីទាំងពីរណ្វៃយ៉ូដ៏តូចត្រូវស្ថិតនៅចំកណ្តាលស្វ៊ែ ។ ស្វ៊ែទាំងនេះតាងឱ្យតំបន់ ដែលមានប្រូបាប៊ីលីតេនៃការរកឃើញអេឡិចត្រុង99 ភាគរយ ។ ប្រូបាប៊ីលីតេសរុបមិនអាចតាងបានទេ ព្រោះប្រូបាប៊ីលីតេនៃការរកឃើញអេឡិចត្រុងធ្លាក់ចុះដល់សូន្យគឺនៅត្រង់ចម្ងាយមិនកំណត់ ពីណ្វៃយ៉ូប៉ុណ្ណោះ ។



រូប1.6 ការតាងនៃទ្រង់ទ្រាយអរបីតាល់ 1s និង 2s [Adapted from D.A.McQuarrie and P.A.Rock. *General Chemistry,* 2nd ed. (New York: W.H.Freeman 1991).p.322]

ប្រូបាប៊ីលីតេនៃការរកឃើញអេឡិចត្រុងក្នុងអរបីតាល់តែងតែវិជ្ជមានជានិច្ច(ព្រោះប្រូបាប៊ីលីតេត្រូវបានទាញយកពីការេនៃអនុគមន៍រលក ហើយការេនៃតម្លៃអវិជ្ជមានគឺទៅជាវិជ្ជមាន) ។ ប៉ុន្តែ នៅពេលដែលយើងពិភាក្សាការចងសម្ព័ន្ធអាតូម យើងរកឃើញថាសញ្ញា ដែលទាក់ទងទៅនឹងអនុគមន៍រលកដើមមានសារៈសំខាន់។ ដោយសារហេតុផលនេះ វាជាធម្មតាគេដាក់សញ្ញានៃអនុគមន៍រលក នៅលើតំណាងអរបីតាល់អាតូមនីមួយៗ។ សម្រាប់អរបីតាល់អាតូម s សញ្ញា គឺវិជ្ជមាន។



រូប1.7 ការផ្លាស់ប្តូរនៃអនុគមន៍របាយដង់ស៊ីតេកាំ (radial density distribution function) ជាមួយនឹងចម្ងាយពីណ្វៃយ៉ូរបស់អេឡិចត្រុងក្នុងអរបីតាល់ 1s, 2s និង 3s នៃអាតូមអ៊ីដ្រូសែន។

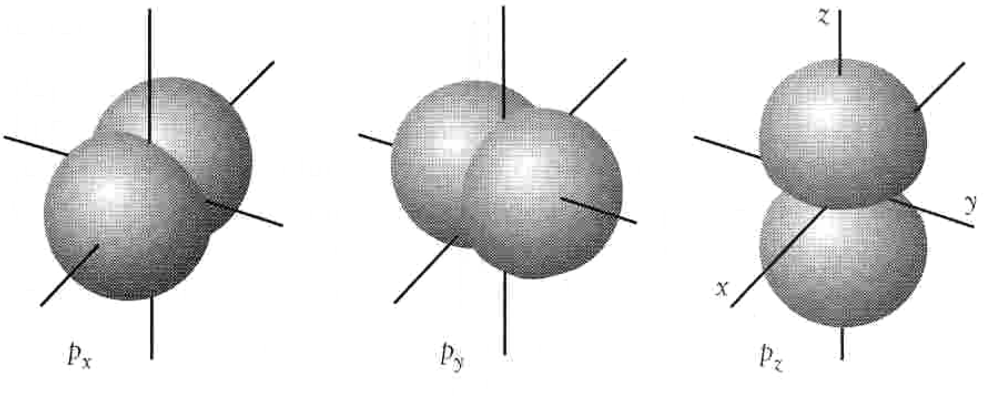
បន្ថែមទៅលើភាពខុសគ្នាដ៏ធំធេងរវាងទំហំអរបីតាល់ 1s និង 2s នៅចម្ងាយពិតប្រាកដមួយ អរបីតាល់ 2s មានផ្ទៃរាងជាស្វ៊ែដែលមានដង់ស៊ីតេអេឡិចត្រុងស្មើសូន្យ។ ផ្ទៃមួយដែលមានប្រូបាប៊ីលីតេនៃការរកឃើញអេឡិចត្រុងស្មើសូន្យត្រូវបានគេហៅថា**ផ្ទៃថ្នាំង** (nodal surface)។ ពេល

ដែលចំនួនកង់ទិចមេកើនឡើងមួយ ចំនួនផ្ទៃថ្នាំងក៏កើនឡើងមួយដែរ។ យើងអាចធ្វើឱ្យមើលឃើញផ្ទៃថ្នាំងកាន់តែច្បាស់ដោយគូសក្រាបអនុគមន៍របាយដង់ស៊ីតេកាំជាអនុគមន៍នៃចម្ងាយពីណ្វៃយ៉ូ សម្រាប់ទិសដៅណាក៏បាន។ រូប1.7 បង្ហាញអរប៊ីតាល់ 1s, 2s និង 3s។ ក្រាបទាំងនេះបង្ហាញថា អេឡិចត្រុងមានទំនោរនឹងនៅឆ្ងាយពីណ្វៃយ៉ូខណៈពេលដែលចំនួនកង់ទិចមេកើនឡើង។ តំបន់ទាំងឡាយនៅក្រោមខ្សែកោងទាំងបីគឺមានភាពដូចគ្នា។

អេឡិចត្រុងក្នុងអរប៊ីតាល់ s ខុសពីអេឡិចត្រុងក្នុងអរប៊ីតាល់ p, d, ឬ f យោងតាមចំណុចសំខាន់ពីរយ៉ាង។ ទី1 មានតែអរប៊ីតាល់ s ប៉ុណ្ណោះដែលមានដង់ស៊ីតេអេឡិចត្រុងប្រែប្រួលដូចៗគ្នាតាមគ្រប់ទិសដៅចេញក្រៅណ្វៃយ៉ូអាតូម។ ទី2 វាមានប្រូបាប៊ីលីតេវិជ្ជមានមួយ ដែលអេឡិចត្រុងក្នុងអរប៊ីតាល់ s គឺស្ថិតនៅក្នុងណ្វៃយ៉ូអាតូម។ អរប៊ីតាល់ផ្សេងៗដទៃទៀតមានថ្នាំងនៅណ្វៃយ៉ូ។

អរប៊ីតាល់ p

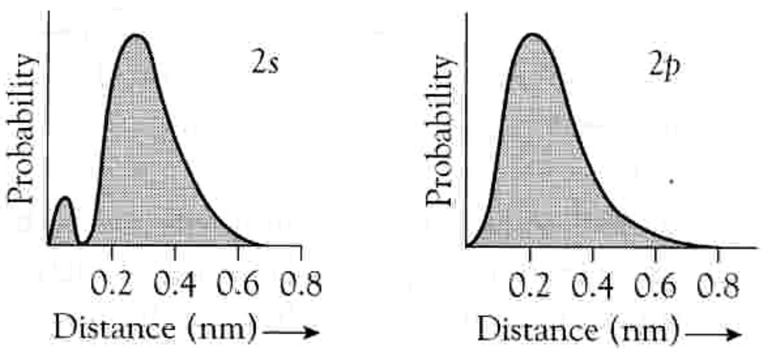
មិនដូចអរប៊ីតាល់ s ទេ អរប៊ីតាល់ p មិនមែនជាស៊ីមេទ្រីជាស្វ៊ែទេ។ តាមការពិត អរប៊ីតាល់ p មានមាឌនៃលំហពីរដាច់ដោយឡែកពីគ្នា ដែលមានណ្វៃយ៉ូនៅចន្លោះ**ឡូប** (lobes) ទាំងពីរ។ ដោយសារវាមានអរប៊ីតាល់ p បី យើងកំណត់ ទិសដៅអរប៊ីតាល់នីមួយៗយោងតាមអ័ក្សដេកាត: យើងមាន p_x, p_y និង p_z។ រូប1.8 បង្ហាញតំណាងអរប៊ីតាល់ 2p ចំនួនបី។ នៅកាត់កែងទៅអ័ក្សអាប់ស៊ីសនៃប្រូបាប៊ីលីតេខ្ពស់ជាង មានប្លង់ថ្នាំងមួយកាត់តាមណ្វៃយ៉ូ។ ឧទាហរណ៍អរប៊ីតាល់ $2p_z$ មានផ្ទៃថ្នាំងនៅលើប្លង់ xy។ ចំពោះសញ្ញាអនុគមន៍រលក. ឡូបមួយមានសញ្ញាវិជ្ជមាន ហើយមួយទៀតមានសញ្ញាអវិជ្ជមាន។



រូប1.8: រូបតំណាងទ្រង់ទ្រាយអរប៊ីតាល់ $2p_x$, $2p_y$, $2p_z$ [Adapted from L.Jones and P.Atkins, *Chemistry: Molecules, Matter, and Change,* 3rd ed. (New York: W.H.Freeman, 1997).p.231.]

ប្រសិនបើយើងប្រៀបធៀបក្រាបដង់ស៊ីតេអេឡិចត្រុងជាអនុគមន៍កាំអាតូមសម្រាប់អរប៊ីតាល់ 2s និង 2p (ដោយដាក់2pលើអ័ក្សអាប់ស៊ីសនៃប្រូបាប៊ីលីតេខ្ពស់ជាង) យើងរកឃើញថា អរប៊ីតាល់ 2s

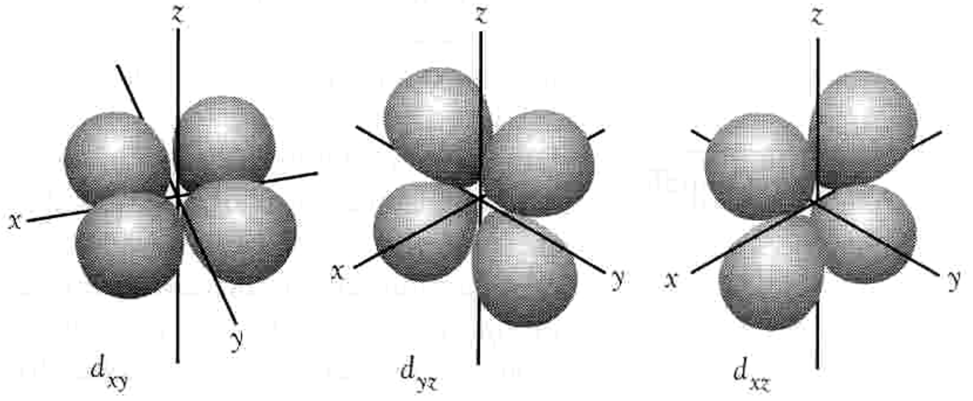
មានដង់ស៊ីតេអេឡិចត្រុងជិតណ្វៃយ៉ូធំជាងអរប៊ីតាល់ 2p (រូប1.9)។ ផ្ទុយមកវិញ ពិចទីពីរនៃអរប៊ីតាល់ 2s គឺឆ្ងាយជាងពិចនៃអរប៊ីតាល់ 2p។ ទោះបីជាយ៉ាងណាក៏ដោយចម្ងាយមធ្យមនៃពិច គឺដូចគ្នាសម្រាប់អរប៊ីតាល់ទាំងពីរ។



រូប1.9 ការផ្លាស់ប្តូរនៃអនុគមន៍របាយដង់ស៊ីតេកាំ (radial density distribution function) ជាមួយនឹងចម្ងាយពីណ្វៃយ៉ូរបស់អេឡិចត្រុងក្នុងអរប៊ីតាល់ 2s និង 2p នៃអាតូមអ៊ីដ្រូសែន។

ដូចជាអរប៊ីតាល់ s ដែរ អរប៊ីតាល់ p បង្កើតផ្ទៃថ្នាំងបន្ថែមក្នុងទ្រង់ទ្រាយអរប៊ីតាល់ពេលដែលចំនួនកង់ទិចមេកើនឡើង។ ដូច្នេះ អរប៊ីតាល់ 3p មើលទៅមិនដូចជាអរប៊ីតាល់ 2p ឡើយ ព្រោះវាមានផ្ទៃថ្នាំងបន្ថែម។ ប៉ុន្តែ ភាពខុសគ្នាដ៏ពិស្តារក្នុងរូបរាងអរប៊ីតាល់សម្រាប់ចំនួន កង់ទិចម៉ូម៉ង់នៃមុំពិសេស មួយមានភាពទាក់ទងគ្នាបន្តិចបន្តួចក្នុងបរិបទគីមីអសរីរាង្គមូលដ្ឋាន។

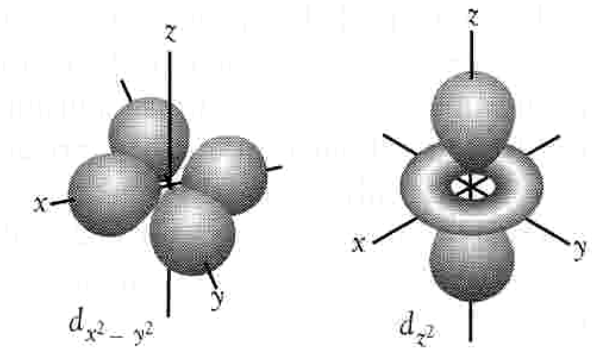
អរប៊ីតាល់ d



រូប1.10 :រូបរាងតំណាងអរប៊ីតាល់ $3d_{xy}$, $3d_{xz}$ និង $3d_{yz}$ [Adapted from L.Jones and P.Atkins, *Chemistry: Molecules, Matter, and Change,* 3rd ed. (New York: W.H.Freeman, 1997).p.232.]

អរប៊ីតាល់ d ទាំងប្រាំមានរូបរាងកាន់តែស្មុគស្មាញ។ អរប៊ីតាល់បីក្នុងចំណោមអរប៊ីតាល់ទាំងប្រាំគឺស្ថិតនៅចន្លោះអ័ក្សដេកាត ហើយអរប៊ីតាល់ពីរទៀតត្រូវបានដៅទិសតាមបណ្តោយអ័ក្ស។ ក្នុងករណីទាំងអស់នេះណ្វៃយ៉ូមានទីតាំងនៅគល់អ័ក្ស។ អរប៊ីតាល់ទាំងបីមានឡូបបួននៅចន្លោះអ័ក្សពីរ (រូប

1.10)។ អរបីតាល់ទាំងនេះត្រូវបានកំណត់ជា d_{xy} d_{xz} និង d_{yz}។ អរបីតាល់ពីរទៀតគឺ d_{z^2} និង $d_{x^2-y^2}$ ត្រូវបាន បង្ហាញក្នុងរូប1.11។ អរបីតាល់ d_{z^2} មើលទៅស្រដៀងនឹង អរបីតាល់ p_z (មើលរូប1.8) លើកលែងតែថា វាមានរង់រាងមូលនៃដង់ស៊ីតេអេឡិចត្រុងខ្ពស់ក្នុងប្លង់ xy។ អរបីតាល់ $d_{x^2-y^2}$ គឺស្រដៀងអរបីតាល់ d_{xy} ប៉ុន្តែវាវិល 45^0។



រូប1.11: រូបរាងតំណាងអរបីតាល់ $3d_{x^2-y^2}$ និង $3d_{z^2}$ [Adapted from L.Jones and P.Atkins, *Chemistry: Molecules, Matter, and Change,* 3rd ed. (New York: W.H.Freeman, 1997).p.232.]

អរបីតាល់ f

អរបីតាល់ f មានលក្ខណៈស្មុគស្មាញជាង អរបីតាល់ d ទៅទៀត។ វាមាន អរបីតាល់ f ចំនួន 7 ដែល អរបីតាល់ 4 មានឡូបប្រាំបី។ អរបីតាល់ 3 ទៀតមានលក្ខណៈដូច អរបីតាល់ d_{z^2} ប៉ុន្តែវាមានរង់រាងមូលពីរ។ អរបីតាល់ទាំងនេះកំរនឹងចូលរួមក្នុងការចងសម្ព័ន្ធណាស់ ដូច្នេះយើងមិនចាំបាច់ពិចារណាវាឱ្យបានពិស្តារទេ។

អាតូមប៉ូលីអេឡិចត្រុង (The Polyelectronic Atom)

ក្នុងគំរូអាតូមប៉ូលីអេឡិចត្រុងរបស់យើង អេឡិចត្រុងត្រូវបានចែកចាយក្នុងចំណោមអរបីតាល់ទាំងឡាយនៃអាតូមយោងតាម **គោលការណ៍ Aufbau** (គោលការណ៍កកើត)។ គំនិតសាមញ្ញនេះស្នើឡើងថា ពេលដែលអេឡិចត្រុងទាំងអស់នៃអាតូមស្ថិតនៅក្នុងសណ្ឋានគ្រឹះវា នៅក្នុងអរបីតាល់នៃថាមពលទាបបំផុត ហេតុដូចនេះវាធ្វើឱ្យថាមពលអេឡិចត្រុងសរុបរបស់អាតូមមានតម្លៃតូចបំផុត។ ដូច្នេះ រូបសណ្ឋានអាតូមមួយអាចត្រូវបានពិពណ៌នាយ៉ាងងាយដោយបូកបន្ថែមអេឡិចត្រុងមួយម្តងៗរហូតទាល់តែចំនួនអេឡិចត្រុងសរុបដែលត្រូវការសម្រាប់ធាតុគ្រប់គ្រាន់។

មុនពេលចាប់ផ្តើមបង្កើតរូបសណ្ឋានអេឡិចត្រុង យើងត្រូវយល់នូវច្បាប់ទី2: **គោលការណ៍ដាច់ដោយឡែកPauli** (The Pauli exclusion principle)។ យោងតាមច្បាប់នេះ អេឡិចត្រុងពីរក្នុងអាតូមមួយមិនអាចមានចំនួនកង់ទិចទាំងបួនដូចគ្នានោះទេ។ ដូច្នេះវាអាចមានអរបីតាល់តែមួយប៉ុណ្ណោះ

ចំពោះក្រុមចំនួនកង់ទិចនីមួយៗក្នុងមួយអាតូម ហើយអរប៊ីតាល់នីមួយៗអាចមានតែពីរអេឡិចត្រុង: អេឡិចត្រុងមួយមាន $m_s = +\frac{1}{2}$ និងមួយទៀតមាន $m_s = -\frac{1}{2}$ ។

ការបំពេញអរប៊ីតាល់ s

រូបសណ្ឋានដ៏ងាយបំផុតនោះគឺរូបសណ្ឋាននៃអាតូមអ៊ីដ្រូសែន។ យោងតាមគោលការណ៍ Aufbau អេឡិចត្រុងទោលរបស់វាត្រូវស្ថិតក្នុងអរប៊ីតាល់ 1s ។ រូបសណ្ឋាននេះជាសណ្ឋានគ្រឹះនៃអាតូមអ៊ីដ្រូសែន។ ការបន្ថែមថាមពលនឹងភ្ញោចអេឡិចត្រុងទៅសណ្ឋានថាមពលខ្ពស់ជាងណាមួយក្នុងចំណោមសណ្ឋានថាមពលជាច្រើន។ រូបសណ្ឋានទាំងនេះត្រូវបានគេហៅថាសណ្ឋានភ្ញោច។ ក្នុងដ្យាក្រាមសណ្ឋានគ្រឹះនៃអាតូមអ៊ីដ្រូសែន (រូប1.12) សញ្ញាព្រួញ (↑) ត្រូវបានប្រើ ដើម្បីបង្ហាញពីទិសដៅស្ពីនអេឡិចត្រុង។ រូបសណ្ឋានអេឡិចត្រុងត្រូវបានសរសេរជា $1s^1$ ដែលស្វ័យគុណ 1 បង្ហាញពីចំនួនអេឡិចត្រុងក្នុងអរប៊ីតាល់។

រូប1.12 សណ្ឋានគ្រឹះនៃអាតូមអ៊ីដ្រូសែន 1s ↑

	(a)		(b)
2s	___	**2s**	↑
1s	↑↓	**1s**	↑

រូប1.13: រូបសណ្ឋានអេឡិចត្រុងពីរដែលអាចមានចំពោះអាតូមអេល្យូម

ចំពោះអាតូមដែលមានពីរអេឡិចត្រុង (អេល្យូម) វាអាចមានជំរើសមួយ: អេឡិចត្រុងទីពីរអាចចូលក្នុងអរប៊ីតាល់ 1s (រូប1.13 a) ឬ អរប៊ីតាល់បន្ទាប់ដែលមានថាមពលខ្ពស់ជាងគឺអរប៊ីតាល់ 2s (រូប1.13 b)។ ទោះបីជាវាហាក់ដូចជាជាក់ស្តែងដែលអេឡិចត្រុងទី 2 នឹងចូលអរប៊ីតាល់ 1s ក៏ដោយក៏វាមិនទូទៅទេ។ ប្រសិនបើអេឡិចត្រុងទី2បំពេញក្នុងអរប៊ីតាល់ 1s នោះ វាអាចនឹងយកមាឌលំហដូចគ្នានឹងអេឡិចត្រុងដែលមានក្នុងអរប៊ីតាល់នោះស្រាប់។ កម្លាំងចម្រានអេឡិចត្រូស្តាទិចដ៏ខ្លាំងក្លានឹងមិនឱ្យមានការយកកន្លែងក្នុងអរប៊ីតាល់តែមួយបានទេ។ សម្រាប់អេល្យូម**ថាមពលដាក់ជាគូ** (pairing energy)ដែលជាថាមពលត្រូវការដើម្បីទប់ទល់នឹងកម្លាំងចម្រានអន្តរអេឡិចត្រុងគឺប្រហែល$3MJ.mol^{-1}$ ។ ប៉ុន្តែ ដោយសារការដាក់អេឡិចត្រុងក្នុងអរប៊ីតាល់ ដែលមានប្រូបាប៊ីលីតេខ្ពស់ហើយជិតនឹងណ្វៃយ៉ូ នោះអេឡិចត្រុងទី2 នឹងរងទំនាញណ្វៃយ៉ូខ្លាំងជាង។ ទំនាញណ្វៃយ៉ូគឺមានតម្លៃធំជាងកម្លាំងចម្រានអន្តរអេឡិចត្រុង។ ដូច្នេះ រូបសណ្ឋានពិតប្រាកដ គឺ$1s^2$ ទោះបីជាវាត្រូវបានគេបញ្ជាក់ថា គូអេឡិចត្រុងក្នុងអរប៊ីតាល់តែមួយកើតមានតែពេលដែលគូអេឡិចត្រុងនៅក៏រិតថាមពលទាបក៏ដោយ។

នៅក្នុងអាតូមលីចូម អរប៊ីតាល់ 1s ត្រូវបានបំពេញដោយពីរអេឡិចត្រុង ហើយអេឡិចត្រុងទីបីត្រូវស្ថិតនៅក្នុងអរប៊ីតាល់បន្ទាប់ដែលមានថាមពលខ្ពស់ជាងគឺអរប៊ីតាល់ 2s ។ ដូច្នេះវាមានរូបសណ្ឋានអេឡិចត្រុង $1s^2$ $2s^1$ ។ ដោយសារភាពខុសគ្នានៃថាមពលអរប៊ីតាល់ s និងអរប៊ីតាល់ p ដែលត្រូវគ្នាតែងតែមានតម្លៃធំជាងថាមពលដាក់ជាគូក្នុងអាតូមប៉ូលីអេឡិចត្រុង នោះរូបសណ្ឋានអេឡិចត្រុងនៃអាតូមបេរីល្យូម $1s^2$ $2s^2$ មិនជា $1s^2$ $2s^1 2p^1$ ។

ការបំពេញអរប៊ីតាល់ p

អាតូមបរកំណត់ការចាប់ផ្តើមបំពេញអរប៊ីតាល់ 2p ។ អាតូមបរមួយមានរូបសណ្ឋានអេឡិចត្រុង $1s^2$ $2s^2 2p^1$ ។ ដោយសារអរប៊ីតាល់ p ទាំងបីគឺ មាន**ថាមពលស្មើគ្នា** (degenerate) នោះវាមិនអាចទៅរួចទេក្នុងការសំរេចថាតើអរប៊ីតាល់ណាមួយក្នុងចំណោមអរប៊ីតាល់ទាំងបីមានអេឡិចត្រុងនោះ ។

កាបូនជាអាតូមទី2ក្នុងសណ្ឋានគ្រឹះដែលអេឡិចត្រុងស្ថិតក្នុងអរប៊ីតាល់ p ។ រូបសណ្ឋានអេឡិចត្រុងរបស់វាផ្តល់ឱ្យនូវបញ្ហាមួយផ្សេងទៀត ព្រោះវាអាចមានការរៀបចំបីចំពោះអេឡិចត្រុង 2p ទាំងពីរ (រូប1.4)គឺ (a): អេឡិចត្រុងទាំងពីរនៅក្នុងអរប៊ីតាល់តែមួយ (b): អេឡិចត្រុងទាំងពីរមានស្ពីនស្របគ្នាក្នុងអរប៊ីតាល់ផ្សេងគ្នា (c) : អេឡិចត្រុងទាំងពីរមានស្ពីនច្រាសគ្នាក្នុងអរប៊ីតាល់ផ្សេងគ្នា ។

(a) (b) (c)

រូប1.14 :រូបសណ្ឋានអេឡិចត្រុងអរប៊ីតាល់ 2p ដែលអាចមានបី ចំពោះអាតូមកាបូន ។

យោងតាមមូលដ្ឋានចម្រានអេឡិចត្រុងលទ្ធភាពទី1(a)អាចច្រានចោលភ្លាម ។ ការសម្រេចរវាងលទ្ធភាពពីរទៀតនោះមានលក្ខណៈពិបាកជាង ហើយត្រូវការចំណេះដឹងពីរទ្រឹស្តីកង់ទិចឱ្យបានស៊ីជំរៅ ។ ជាការពិតប្រសិនបើអេឡិចត្រុងទាំងពីរមានស្ពីនស្របគ្នា ការដៅយកកន្លែងដូចគ្នានោះ វាមានប្រូបាប៊ីលីតេស្មើសូន្យ ។ ទោះបីជាយ៉ាងណាក៏ដោយ ប្រសិនបើស្ពីនផ្ទុយគ្នាវិញ វាមានប្រូបាប៊ីលីតេកំណត់មួយ ដែលអេឡិចត្រុងទាំងពីរនឹងយកកន្លែងតែមួយក្នុងលំហ ហើយដូច្នេះ ឱ្យលទ្ធផលជាចម្រានចេញខ្លះនិងមានសណ្ឋានថាមពលខ្ពស់ជាង ។ ហេតុដូចនេះ ស្ថានភាពដែលស្ពីនស្ថិតនៅស្របគ្នា (b) និងមានថាមពលទាបបំផុត ។ ចំណូលចិត្តនៃ**អេឡិចត្រុងសេរី** (unpaired electron) ដែលស្ថិតនៅជាស្ពីនស្របត្រូវបានធ្វើឱ្យជាក់លាក់ក្នុង **វិធានហ៊ុន** (Hund's rule) : នៅពេលបំពេញអរប៊ីតាល់ degenerate ត្រូវធ្វើឱ្យមានចំនួនអេឡិចត្រុងសេរីធំបំផុត ហើយអេឡិចត្រុងទាំងនេះនឹងមានស្ពីនស្របគ្នា ។

បន្ទាប់ពីការបំពេញអរប៊ីតាល់អេឡិចត្រុង 2p ចំពោះអាតូមនេអុង($1s^2 2s^2 2p^6$) អរប៊ីតាល់ 3s និង 3p ចាប់ផ្តើមបំពេញ ។ ជាជាងការសរសេររូបសណ្ឋានអេឡិចត្រុងទាំងស្រុង គេអាចប្រើទំរង់កាត់ ។ ការកំណត់សរសេរនេះរូបសណ្ឋានអេឡិចត្រុងខាងក្នុងត្រូវបានតាងដោយនិមិត្តសញ្ញាឧស្ម័នកំរ ។ ដូច្នេះ

ម៉ាញេស្យូម ដែលមានរូបសណ្ឋានអេឡិចត្រុងទាំងមូល $1s^22s^22p^63s^2$ អាចតាងដោយមានឧស្ម័នកំរនេអុង ហើយរូបសណ្ឋានរបស់វាអាចសរសេរ $[Ne]3s^2$ ។ សារៈសំខាន់មួយនៃការតាងដោយនិមិត្តសញ្ញាឧស្ម័នកំរនេះគឺថាវាបញ្ជាក់អេឡិចត្រុងខាងក្រៅ (វ៉ាឡង់) ហើយអេឡិចត្រុងទាំងនេះត្រូវបានចូលរួមក្នុងការចងសម្ព័ន្ធ។ នៅត្រង់ចំណុចនេះ យើងបានបញ្ចប់ការវិភាគរបស់យើងចំពោះរូបសណ្ឋានអេឡិចត្រុងនៃខួបខ្លីពីរក្នុងតារាងខួប (រូប1.15)៖ខួបទី2 ចាប់ពីលីចូមដល់នេអុង ហើយខួបទី 3 ចាប់ពីសូដ្យូម ដល់អាកុង។

																	18
1	2							H				13	14	15	16	17	He
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Fr	Ra	Lr	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Uub	Uut	Uuq	Uup	Uuh		
Main Groups						Transition Metals								Main Groups			
Lanthanoids		La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb		
Actinoids		Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No		

រូប1.15៖ លក្ខណៈសំខាន់នៃតារាងខួប។ លេខដែលស្ថិតនៅខាងលើសម្គាល់ក្រុមនៃធាតុ (ជួរឈរ)។ លេខដែលស្ថិតនៅខាងស្តាំដៃចុះក្រោមសម្គាល់ឱ្យខួប (ជួរដេក)។

ការបំពេញអរប៊ីតាល់ d

ពេលដែលអរប៊ីតាល់ 3p ត្រូវបានបំពេញ (អាកុង) អរប៊ីតាល់ 3d និង 4s ចាប់ផ្តើមបំពេញ។ នៅទីនេះហើយ ដែលគំនិតទូទៅទាក់ទងកំរិតថាមពលអរប៊ីតាល់ត្រូវបានចែក ពីព្រោះកំរិតថាមពលនៃអរប៊ីតាល់ 4s និង 3d គឺជិតគ្នាខ្លាំងណាស់។ អ្វីដែលមានសារៈសំខាន់បំផុតនោះគឺមិនមែនថាមពលអប្បបរមាសម្រាប់អេឡិចត្រុងសេរីនោះទេ តែជារូបសណ្ឋានដែលផ្តល់លទ្ធផលក្នុងចំនួនតូចបំផុតនៃចម្រានអេឡិចត្រុងខាងក្នុងសម្រាប់អាតូមទាំងអស់។ ចំពោះប៉ូតាស្យូមមានរូបសណ្ឋាន $[Ar]\ 4s^1$ ហើយកាល់ស្យូមមានរូបសណ្ឋាន $[Ar]4s^2$ ។ ដើម្បីបង្ហាញពីការផ្លាស់ប្តូរដ៏ងាយនៅពេលដែលចំនួន ប្រូតុង និងអេឡិចត្រុងកើនឡើងនោះ អេឡិចត្រុងខាងក្រៅនៃធាតុក្នុងក្រុម3 ដល់ក្រុម 12 ត្រូវបានដាក់ក្នុងតារាងខាងក្រោម។ រូបសណ្ឋានទាំងនេះមិនមានសារៈសំខាន់ខ្លួនវាទេ ប៉ុន្តែវាបង្ហាញភាពនៅជិតគ្នានៃថាមពលអេឡិចត្រុងក្នុង ns និង (n-1)d ។

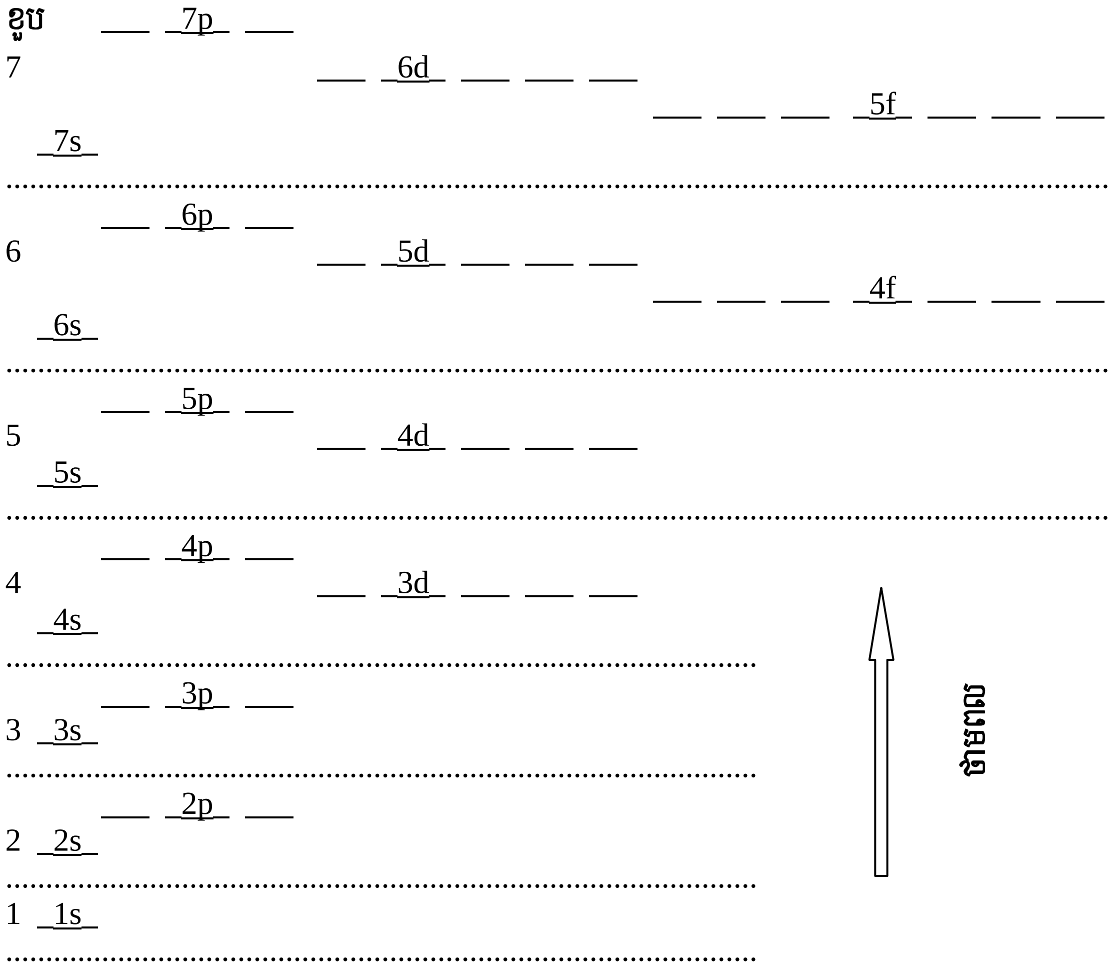
អាតូម	រូបសណ្ឋាន	អាតូម	រូបសណ្ឋាន	អាតូម	រូបសណ្ឋាន
Sc	$4s^23d^1$	Y	$5s^24d^1$	Lu	$6s^25d^1$
Ti	$4s^23d^2$	Zr	$5s^24d^2$	Hf	$6s^25d^2$
V	$4s^23d^3$	Nb	$5s^14d^4$	Ta	$6s^25d^3$
Cr	$4s^13d^5$	Mo	$5s^14d^5$	W	$6s^25d^4$
Mn	$4s^23d^5$	Tc	$5s^24d^5$	Re	$6s^25d^5$
Fe	$4s^23d^6$	Ru	$5s^14d^7$	Os	$6s^25d^6$
Co	$4s^23d^7$	Rh	$5s^14d^8$	Ir	$6s^25d^7$
Ni	$4s^23d^8$	Pd	$5s^04d^{10}$	Pt	$6s^15d^9$
Cu	$4s^13d^{10}$	Ag	$5s^14d^{10}$	Au	$6s^15d^{10}$
Zn	$4s^23d^{10}$	Cd	$5s^24d^{10}$	Hg	$6s^25d^{10}$

ជាទូទៅថាមពលសរុបទាបបំផុតសម្រាប់លោហៈឆ្លងនីមួយៗត្រូវបានទទួលដោយបំពេញអរបីតាល់s មុនហើយបន្ទាប់មកអេឡិចត្រុងដែលនៅសល់បំពេញអរបីតាល់ d ។ ទោះបីជាយ៉ាងណាក៏ដោយសម្រាប់ធាតុមួយចំនួន ថាមពលទាបបំផុតត្រូវបានដោយផ្លាស់ប្តូរអេឡិចត្រុងមួយឬទាំងពីរក្នុងអរបីតាល់ s ទៅអរបីតាល់ d ។ ដោយមើលលើក្រុមដំបូងក្នុងការញែកចេញពីគ្នាអាចនាំទៅរកការសន្និដ្ឋានថាមានការលំអៀងខ្លះៗសម្រាប់ការបំពេញពាក់កណ្តាលឆ្អែតឬឆ្អែតនៃអរបីតាល់ d ចំពោះអាតូមក្រូម និងទង់ដែង។ ទោះបីជាប៉ាឡាដ្យូម និងប្រាក់ក្នុងក្រុមឆ្លងទីពីរអនុគ្រោះឱ្យមានរូបសណ្ឋាន $4d^{10}$ ក៏ដោយ វាមានការពិតប្រាកដជាងក្នុងការនិយាយថាកម្លាំងចម្រានអេឡិចត្រុងខាងក្នុងរវាងអេឡិចត្រុង s ទាំងពីរ គឺគ្រប់គ្រាន់ក្នុងករណីមួយចំនួនដើម្បីផ្តល់រូបសណ្ឋាន s^1 ។

សម្រាប់ធាតុចាប់ពី lanthanum (La) ដល់ Ytterbium (Yb) ការតាំងនៅនៃអេឡិចត្រុងកាន់តែមានភាពប្រែប្រួលពីព្រោះអរបីតាល់ 6s, 5d, និង 4f ទាំងអស់មានថាមពលប្រហាក់ប្រហែលគ្នា។ ឧទាហរណ៍ lanthanum មានរូបសណ្ឋានអេឡិចត្រុង $[Xe]6s^25d^1$ ខណៈពេលដែលធាតុបន្ទាប់ cerium មានរូបសណ្ឋានអេឡិចត្រុង $[Xe]6s^24f^2$ ។ រូបសណ្ឋានអេឡិចត្រុងដ៏គួរឱ្យចាប់អារម្មណ៍បំផុតក្នុងខួបនេះគឺ gadolinium ដែលមានរូបសណ្ឋាន $[Xe]6s^25d^14f^7$ ហើយមិនមែនមានរូបសណ្ឋានតាមការទស្សន៍ទាយទុក $[Xe]6s^24f^8$ នោះទេ។ រូបសណ្ឋាននេះផ្តល់ឱ្យនូវភស្តុតាងបន្ថែមទាក់ទងសារៈសំខាន់នៃចម្រានអេឡិចត្រុងខាងក្នុងកម្លាំងចម្រាន interelectron ក្នុងការកំណត់រូបសណ្ឋានអេឡិចត្រុងពេលអរបីតាល់ដែលនៅជិតគ្នាមានថាមពលប្រហាក់ប្រហែលគ្នាឬស្រដៀងគ្នា។ ភាពសាំញ៉ាំស្រដៀងគ្នានេះក៏កើតឡើងក្នុងចំណោមធាតុទាំងឡាយចាប់ពី actinium(Ac) ដល់ nobelium(No) ដែលក្នុងនោះអរបីតាល់ 7s, 6d, និង 5f មានថាមពលប្រហាក់ប្រហែលគ្នា។

បើទោះបីជាមានភាពប្រែប្រួលរូបសណ្ឋានបន្តិចបន្តួចនៃធាតុក្នុងប្លុក d និង ប្លុក f ក៏ដោយលំដាប់នៃការបំពេញអេឡិចត្រុងគឺមិនផ្លាស់ប្តូរទេ:

1s 2s 2p 3s 3p 4s 3d 4p 5s 4d 5p 6s 4f 5d 6p 7s 5f 6d 7p



រូប1.16:ការតាងនៃការប្រៀបធៀបថាមពលអរបីតាល់អាតូមសម្រាប់បំណងនៃការបំពេញតាមលំដាប់

បើទោះបីជានៅលើផែនដីគ្រប់អាតូមទាំងអស់ស្ថិតក្នុងសណ្ឋានគ្រឹះរបស់វាក៏ដោយ វាមិនពិតទេចំពោះលំហអន្តរតារា។ ការឆ្លងអេឡិចត្រុងនៃអាតូមអ៊ីដ្រូសែនពីកំរិត n=253 ទៅ n=252 ត្រូវបានគេសង្កេតឃើញនៅតំបន់នេះនៃសកលលោក។ កាំអាតូម Bohr សម្រាប់អាតូមអ៊ីដ្រូសែននេះប្រហែលជា 0.34mm ដែលធ្វើឱ្យអាតូមធំនិងអាចមើលឃើញបាន(តាមទ្រឹស្តី)។

លំដាប់នេះត្រូវបានបង្ហាញក្នុងរូប 1.16។ អរបីតាល់បំពេញតាមលំដាប់នេះព្រោះភាពខុសគ្នានៃថាមពលរវាងអរបីតាល់ s, p, d និង f ដែលមានចំនួនកង់ទិចមេដូចគ្នា នោះទៅជាខុសគ្នាខ្លាំងលើស n=2 ដែលវាជាន់ទៅលើអរបីតាល់នៃចំនួនកង់ទិចមេបន្ទាប់។ វាមានសារៈសំខាន់ក្នុងការកត់សម្គាល់ថា រូប1.16 បង្ហាញការបំពេញអេឡិចត្រុងតាមលំដាប់ តែមិនមែនលំដាប់សម្រាប់ធាតុណាមួយនោះទេ។ ឧទាហរណ៍ សម្រាប់ធាតុហួសពីស័ង្កសីគឺអេឡិចត្រុងក្នុងអរបីតាល់ 3d មានថាមពល ទាបជាងថាមពលអេឡិចត្រុងក្នុងអរបីតាល់ 4s ឆ្ងាយ។ ដូច្នេះត្រង់ចំណុចនេះ អរបីតាល់ 3d ក្លាយជា អរបីតាល់ខាងក្នុង ហើយគ្មានតួនាទីក្នុងការចងសម្ព័ន្ធគីមីទេ។ ហេតុនេះលំដាប់ជាក់លាក់របស់វា គឺគ្មានសារៈសំខាន់ទេ។

រូបសណ្ឋានអេឡិចត្រុងនៃអ៊ីយ៉ុង

សម្រាប់ធាតុក្នុងក្រុមមេដំបូង រូបសណ្ឋានអេឡិចត្រុងអ៊ីយ៉ុងទូទៅអាចត្រូវបានគេទស្សន៍ទាយទុកយ៉ាងស្រួល។ លោហៈមានទំនោរបាត់បង់អេឡិចត្រុងទាំងអស់ក្នុងអរបីតាល់ខាងក្រៅ។ ស្ថានភាពនេះត្រូវបានបង្ហាញថាជាស៊េរី**អ៊ីសូអេឡិចត្រូនិច** (រូបសណ្ឋានអេឡិចត្រុងដូចគ្នា) នៃកាចុងសូដ្យូម ម៉ាញេស្យូម និងអាលុយមីញ៉ូមៈ

អាតូម	រូបសណ្ឋានអេឡិចត្រុង	អ៊ីយ៉ុង	រូបសណ្ឋានអេឡិចត្រុង
Na	[Ne]$3s^1$	Na^+	[Ne]
Mg	[Ne]$3s^2$	Mg^{2+}	[Ne]
Al	[Ne]$3s^2 3p^1$	Al^{3+}	[Ne]

អលោហៈទទួលយកអេឡិចត្រុងដើម្បីបំពេញអរបីតាល់ខាងក្រៅ។ ស្ថានភាពនេះអាចត្រូវបានបង្ហាញសម្រាប់អាញ៉ុងអាសូត. អុកស៊ីសែន. និងភ្លុយអរៈ

អាតូម	រូបសណ្ឋានអេឡិចត្រុង	អ៊ីយ៉ុង	រូបសណ្ឋានអេឡិចត្រុង
N	[He]$2s^2 2p^3$	N^{3-}	[Ne]
O	[He] $2s^2 2p^4$	O^{2-}	[Ne]
F	[He] $2s^2 2p^5$	F^-	[Ne]

លោហៈខ្លះនៃក្រុមមេបន្ទាប់បង្កើតទំរង់អ៊ីយ៉ុងពីរ ដែលមានបន្ទុកផ្សេងគ្នា។ ឧទាហរណ៏ សំណមានទំរង់អ៊ីយ៉ុង Pb^{2+} និង Pb^{4+} (ដោយកំរ)។ បន្ទុក 2+ អាចត្រូវបានពន្យល់ដោយការបាត់បង់តែអេឡិចត្រុងក្នុងអរបីតាល់ 6p ប៉ុណ្ណោះ ប៉ុន្តែបន្ទុក 4+ ជាលទ្ធផលនៃការបាត់បង់អេឡិចត្រុងទាំងក្នុងអរបីតាល់ 6s និង 6p ។

អាតូម	រូបសណ្ឋានអេឡិចត្រុង	អ៊ីយ៉ុង	រូបសណ្ឋានអេឡិចត្រុង
Pb	[Xe]$6s^2 4f^{14} 5d^{10} 6p^2$	Pb^{2+} Pb^{4+}	[Xe] $6s^2 4f^{14} 5d^{10}$ [Xe] $4f^{14} 5d^{10}$

គួរកត់សម្គាល់ថាអេឡិចត្រុងនៃចំនួនកង់ទិចមេខ្ពស់ជាងត្រូវបាត់បង់មុន។ វិធាននេះត្រូវបានរកឃើញថាត្រឹមត្រូវសម្រាប់គ្រប់ធាតុទាំងអស់។ ចំពោះលោហៈឆ្លង អេឡិចត្រុងក្នុងអរបីតាល់ s តែងតែបាត់បង់មុនក្នុងពេលដែលកាចុងលោហៈត្រូវបានបង្កើត។ ចំពោះកាចុងនៃលោហៈឆ្លងអរបីតាល់ 3d តែងតែមានថាមពលទាបជាងអរបីតាល់ 4s ហើយបន្ទុក2+ ដែលតំណាងឱ្យការបាត់បង់អេឡិចត្រុងចំនួនពីរក្នុងអរបីតាល់ s នោះ គឺជាលក្ខណៈទូទៅសម្រាប់លោហៈឆ្លងនិងលោហៈក្នុងក្រុម12។ ឧទាហរណ៏ ស័ង្កសីតែងតែបង្កើតអ៊ីយ៉ុងដែលមានបន្ទុក2+ ។

អាតូម	រូបសណ្ឋានអេឡិចត្រុង	អ៊ីយ៉ុង	រូបសណ្ឋានអេឡិចត្រុង
Zn	[Ar]$4s^2 3d^{10}$	Zn^{2+}	[Ar] $3d^{10}$

ដែកបង្កើតអ៊ីយ៉ុងដែលមានបន្ទុក 2+ និង 3+ ហើយការបង្ហាញខាងក្រោមនេះ ត្រូវបានទាក់ទងហេតុផលនៃការបង្កើតអ៊ីយ៉ុង 3+ ចំពោះដំណើរការមួយដែលក្នុងនោះចម្រានអេឡិចត្រុងខាងក្នុងបង្ខំតែអេឡិចត្រុងគូក្នុងអរបីតាល់ d ប៉ុណ្ណោះ។

អាតូម	រូបសណ្ឋានអេឡិចត្រុង	អ៊ីយ៉ុង	រូបសណ្ឋានអេឡិចត្រុង
Fe	$[Ar]4s^2 3d^6$	Fe^{2+} Fe^{3+}	$[Ar]3d^6$ $[Ar]3d^5$

ទោះបីជាយ៉ាងណាក៏ដោយ វាជាការគ្រោះថ្នាក់ក្នុងការអានតែរូបសណ្ឋានអេឡិចត្រុងនៃអាតូម ហើយយកជាមធ្យោបាយទស្សន៍ទាយបន្ទុកអ៊ីយ៉ុងនោះ។ ស៊េរីនៃនីកែល ប៉ាឡាដ្យូមនិងប្លាទីន បង្ហាញត្រង់ចំណុចនេះ វាមានរូបសណ្ឋានអេឡិចត្រុងផ្សេងៗគ្នា ប៉ុន្តែបន្ទុកអ៊ីយ៉ុងទូទៅនិងរូបសណ្ឋានអេឡិចត្រុងនៃអ៊ីយ៉ុងដែលត្រូវគ្នាគឺមានលក្ខណៈស្រដៀងគ្នា:

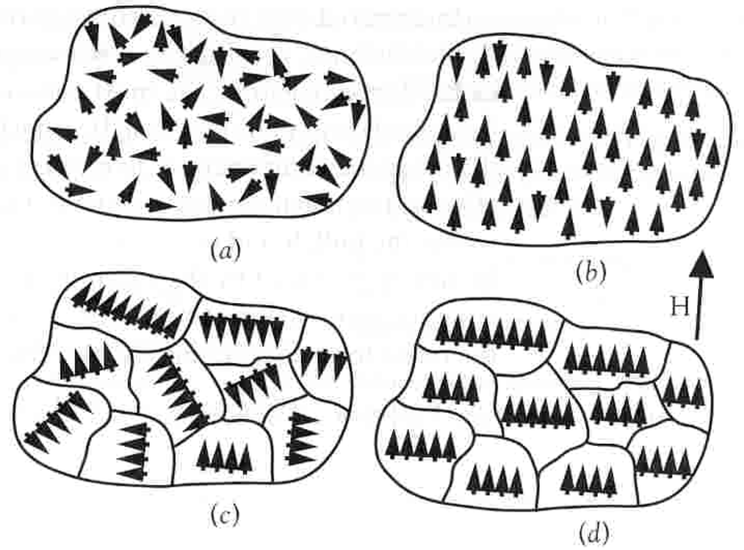
អាតូម	រូបសណ្ឋានអេឡិចត្រុង	អ៊ីយ៉ុង	រូបសណ្ឋានអេឡិចត្រុង
Ni	$[Ar]4s^2 3d^8$	Ni^{2+}	$[Ar]3d^8$
Pd	$[Kr]5s^0 4d^{10}$	Pd^{2+}, Pd^{4+}	$[Kr]\ 4d^8$, $[Kr]\ 4d^6$
Pt	$[Xe]6s^1 5d^9$	Pt^{2+}, Pt^{4+}	$[Xe]5d^8$, $[Xe]5d^6$

លក្ខណៈម៉ាញេទិចនៃអាតូម

នៅក្នុងការពិភាក្សានៃរូបសណ្ឋានអេឡិចត្រុង យើងបានឃើញថាអាតូមខ្លះមានអេឡិចត្រុងសេរី។ វត្តមាននៃអេឡិចត្រុងសេរីនៅក្នុងអាតូមនៃធាតុមួយអាចកំនត់បានយ៉ាងងាយតាមរយៈលក្ខណៈម៉ាញេទិចនៃធាតុ។ ប្រសិនបើអាតូមដែលមានតែអេឡិចត្រុងស្ពីនគូត្រូវបានដាក់ក្នុងដែនម៉ាញេទិច វាត្រូវបានច្រានចេញយ៉ាងខ្សោយដោយដែនម៉ាញ៉េទិច។ បាតុភូតនេះត្រូវបានគេហៅថា **ដ្យាម៉ាញេទិច** (diamagnetic)។ ផ្ទុយមកវិញអាតូមដែលមានអេឡិចត្រុងសេរីមួយឬច្រើនរងទំនាញដោយដែនម៉ាញេទិច។ លំនាំនេះត្រូវបានគេឱ្យឈ្មោះថា **ប៉ារ៉ាម៉ាញេទិច** (paramagnetic)។ ទំនាញនៃអេឡិចត្រុងសេរីនីមួយៗគឺខ្លាំងជាងច្រើនដងនៃទំនាញ អេឡិចត្រុងស្ពីនគូ ទាំងអស់ក្នុងអាតូម។

ដើម្បីពន្យល់ពីប៉ារ៉ាម៉ាញេទិចឱ្យមានភាពងាយស្រួល យើងអាចនឹកគិតថាអេឡិចត្រុងជាភាគល្អិតវិលលើអ័ក្សអាប់ស៊ីសរបស់វាហើយបង្កើតម៉ូម៉ង់ម៉ាញេទិចមួយ ដែលហាក់ដូចជាចរន្តឆ្លងកាត់ខ្សែភ្លើងដែរ។ ម៉ូម៉ង់អចិន្ត្រៃយ៍នេះផ្តល់លទ្ធផលជាទំនាញទៅក្នុងផ្នែកខ្លាំងនៃដែន។ នៅពេលដែលអេឡិចត្រុងមានស្ពីនគូ នោះម៉ូម៉ង់ម៉ាញេទិចត្រូវបានអព្យាក្រឹតគ្នាទៅវិញទៅមក។ ជាលទ្ធផលគូអេឡិចត្រុងត្រូវបានច្រានយ៉ាងខ្សោយដោយបន្ទាត់នៃកម្លាំងម៉ាញេទិច។ នៅក្នុងសារធាតុប៉ារ៉ាម៉ាញេទិចការដាក់ដែនម៉ាញេទិចបានតម្រៀបស្ពីនអេឡិចត្រុងខ្លះ ដែលជាធម្មតាវាដៅទិសមិនច្បាស់លាស់ជាមួយនឹងដែនម៉ាញេទិចអនុវត្តន៍ (រូប1.17a និង b)។ ការតម្រៀបនេះហើយដែលផ្តល់ផលជាទំនាញនៃអេឡិច

ត្រុងក្នុងដែនម៉ាញេទិច។ យើងនឹងជួបប្រទះបាតុភូតនេះម្តងទៀតក្នុងការពិភាក្សារបស់យើងទាក់ទង សម្ព័ន្ធកូវ៉ាឡង់ និងការចងសម្ព័ន្ធក្នុងសមាសធាតុលោហៈឆ្លង។



រូប1.17 លក្ខណៈនៃសារធាតុប៉ារ៉ាម៉ាញ៉េទិច ដែលគ្មានដែនម៉ាញេទិច (a), មានដាក់ដែនម៉ាញេទិច (b), និងសារធាតុផែរ៉ូម៉ាញេទិច ដែលគ្មានដែនម៉ាញេទិច (c), និងមានដែនម៉ាញេទិច (d)។

វាមានទំរង់ទូទៅទី3ទាក់ទងផងដែរនឹងលក្ខណៈម៉ាញេទិចគឺ **ផែរ៉ូម៉ាញេទិច** (ferromagnetic)។ នៅក្នុងសារធាតុផែរ៉ូម៉ាញេទិច អេឡិចត្រុងសេរីត្រូវបានរៀបស្របគ្នានឹងអេឡិចត្រុងជិតខាង ទោះបីជាអវត្តមានដែនម៉ាញេទិចក៏ដោយ។ ក្រុមនៃស្ពីនដែលបានរៀបចំទាំងនេះត្រូវបានគេស្គាល់ថាជា **តំបន់ម៉ាញេទិច** (domain)។ ការដាក់ដែនម៉ាញ៉េទិចបណ្តាលឱ្យតំបនម៉ាញេទិចទាំងអស់នេះតម្រៀបស្រប ទៅនឹងដែនម៉ាញេទិច (រូប1.17 c និង d)។ ការតម្រៀបនេះគឺខ្លាំងជាងប៉ារ៉ាម៉ាញេទិច ហើយវាអាចអចិន្ត្រៃយ៍។

លក្ខណៈផែរ៉ូម៉ាញេទិចត្រូវបានរកឃើញក្នុងធាតុ (ហើយនឹងសមាសធាតុរបស់វាខ្លះ) ដែលមានអេឡិចត្រុងសេរីក្នុងអរប៊ីតាល់ d ឬ f។ អេឡិចត្រុងក្នុងអរប៊ីតាល់ទាំងនេះមានអន្តរកម្មយ៉ាងខ្សោយជាមួយនឹងអេឡិចត្រុងនៃអាតូមជិតខាងដើម្បីឱ្យផលកើតឡើង។ បាតុភូតនេះកើតឡើងតែចំពោះតែធាតុក្នុងប្លុក 3d និង 4f ប៉ុណ្ណោះ។ នៅពេលដែលសារធាតុផែរ៉ូម៉ាញេទិចត្រូវបានដុតកម្តៅ លំញ័រអាតូមបណ្តាលឱ្យមានការបំផ្លាញតម្រៀបក្នុងតំបន់ម៉ាញេទិច់ រហូតដល់ **សីតុណ្ហភាពគុយរី** (Curie temperature) ហើយសារធាតុនោះត្រលប់ទៅជាលក្ខណៈប៉ារ៉ាម៉ាញេទិចខ្សោយជាង។ មានតែលោហៈបួនប៉ុណ្ណោះ ដែលសំដែងឱ្យឃើញមានលក្ខណៈផែរ៉ូម៉ាញេទិច ហើយមានប្រែលក្ខណៈម៉ាញេទិចនៅខាងលើ 0^0C គឺ ដែក កូបាល់ នីកែល និងហ្គាដូលីញ៉ូម។

ចំនែកថ្នាក់ទីបួននៃលក្ខណៈម៉ាញេទិចគឺ **អង់ទីផេរ៉ូម៉ាញេទិច** (antiferromagnetic)។ សារធាតុអង់ទីផេរ៉ូម៉ាញេទិចមានលក្ខណៈស្រដៀងគ្នានឹងផេរ៉ូម៉ាញេទិច លើកលែងតែអន្តរកម្មរវាងអាតូមជិតខាង ដែលឱ្យលទ្ធផលជាការតម្រៀបមិនស្របគ្នា។ ដូច្នេះ ទំនាញក្នុងដែនម៉ាញេទិចគឺខ្សោយជាង ផលប៉ារ៉ាម៉ាញេទិចដែលអាចទស្សន៍ទាយ ប៉ុន្តែចំពោះតែ**សីតុណ្ហភាពនៀល** (Neel temperature) ប៉ុណ្ណោះដែលសារធាតុអង់ទីផេរ៉ូម៉ាញេទិចត្រលប់ទៅជាលក្ខណៈប៉ារ៉ាម៉ាញេទិចវិញ។

នៅក្នុងករណីពិសេសនៃអង់ទីផេរ៉ូម៉ាញេទិច ចំនួននៃស្ពីនច្រាសមិនមានតុល្យភាពទេ ដែលឱ្យលទ្ធផលជាលក្ខណៈម៉ាញេទិចសរុបក្នុងទិសដៅមួយ។ នេះត្រូវបានគេហៅថាលក្ខណៈ **ផេរីម៉ាញេទិច** (ferrimagnetic)។ សារធាតុផេរីម៉ាញេទិច ធម្មតាបំផុតនោះគឺ Fe_3O_4 សណ្ឋានអុកស៊ីតកម្មលាយគ្នាដែក(II) ដែក(III) អុកស៊ីត។ អុកស៊ីតនេះមានសារៈសំខាន់ជាសមាសភាពម៉ាញេទិចនៃ **សន្ទនីយដែក** (ferrofluids)(អង្គធាតុរាវម៉ាញេទិច)។ ធាតុរាវនេះត្រូវបានទាញដោយដែនម៉ាញេទិច។ តាមពិតភាគល្អិតអង្គធាតុរឹងកូឡូអ៊ីតដែកអុកស៊ីត ក្នុងអង្គធាតុរាវ ត្រូវបានទាញចូលក្នុងដែនម៉ាញេទិច។ សន្ទនីយដែកអាចត្រូវបានរៀបចំដោយប្រតិកម្មនៃដែក(III) និង ដែក(II)ក្លរួ ជាមួយអាម៉ូញាក់រាវក្នុងវត្តមាននៃសារធាតុជំរះក្អែលដែលការពារអុកស៊ីតពីការកកៈ

$$2FeCl_3(aq)+FeCl_2(aq)+8NH_3+4H_2O(l)\rightarrow Fe_3O_4(s)+8NH_4Cl(aq)$$

គំនិតសំខាន់

- លក្ខណៈនៃអេឡិចត្រុងក្នុងអាតូមអាចកំណត់បានដោយចំនួនកង់ទិចបួន។
- រូបរាងនៃអរប៊ីតាល់មានច្រើន (s, p, d, f) ដែលកំណត់ដោយចំនួនកង់ទិចម៉ូម៉ង់នៃមុំ។
- អេឡិចត្រុងនៅក្នុងសណ្ឋានគ្រឹះនៃអាតូមបំពេញអរប៊ីតាល់ទាំងឡាយនៃថាមពលទាបបំផុត។
- សម្រាប់លោហៈឆ្លង ថាមពលនៃអរប៊ីតាល់ ns និង (n-1)d គឺស្រដៀងគ្នា។
- ចំពោះកំណកាចុង អេឡិចត្រុងនៅក្នុងអរប៊ីតាល់នៃចំនួនកង់ទិចមេខ្ពស់បំផុតត្រូវបាត់បង់មុន។
- លក្ខណៈប៉ារ៉ាម៉ាញេទិចក្នុងដែនម៉ាញេទិចបង្ហាញវត្តមានអេឡិចត្រុងសេរី។

ពាក្យសំខាន់

ចំនួនកង់ទិចម៉ូម៉ង់នៃមុំ *l*	angular momentum quantum number *l*	1-5
អង់ទីផេរ៉ូម៉ាញេទិច	antiferromagnetic	1-21
ស្ប៉ិចសំរូបអាតូម	atomic absorption spectroscopy	1-3
គោលការណ៍ Aufbau	Aufbau principle	1-12
គំរូអាតូមបរ	Bohr atomic model	1-2

សីតុណ្ហភាពគុយរី	Curie temperature	1-20
អរប៊ីតាល់ស្មើគ្នានៃថាមពល	degenerate orbital	1-14
ដ្យាម៉ាញេទិច	diamagnetic	1-19
តំបន់ម៉ាញេទិច	domain	1-20
ដង់ស៊ីតេអេឡិចត្រុង	electron density	1-8
សណ្ឋានភ្ញោច	excited state	1-3
ផែរីម៉ាញេទិច	ferrimagnetic	1-21
សន្ទនីយដែក	ferrofluids	1-21
ផែរ៉ូម៉ាញេទិច	ferromagnetic	1-20
សណ្ឋានគ្រឹះ	ground state	1-3
វិធានហ៊ុន	Hund's rule	1-14
អ៊ីសូអេឡិចត្រូនិច	isoelectronic	1-18
ចំនួនកង់ទិចម៉ាញ៉េទិច m_l	magnetic quantum number m_l	1-5
សីតុណ្ហភាពនៀល	Néel temperature	1-21
ផ្ទៃថ្នាំង	nodal surface	1-9
ថាមពលដាក់ជាគូ	pairing energy	1-13
ប៉ារ៉ាម៉ាញ៉េទិច	paramagnetic	1-19
គោលការណ៍ Pauli ដាច់ដោយឡែក	Pauli exclusion principle	1-12
ចំនួនកង់ទិចមេ n	principal quantum number n	1-5
ចំនួនកង់ទិច	quantum number	1-2
រីឡាទីវីស	relativity	1-7
សមីការរលក Schrödinger	Schrödinger equation	1-4
ចំនួនកង់ទិចស្ពីន m_s	spin quantum number m_s	1-5
ផល Zeeman	Zeeman effect	1-3

លំហាត់

1.1 ចូរឱ្យនិយមន័យពាក្យទាំងនេះ : (a) ផ្ទៃថ្នាំង (b) គោលការណ៍លើកលែង Pauli (c) ប៉ារ៉ាម៉ាញ៉េទិច ។

1.2 ចូរឱ្យនិយមន័យពាក្យទាំងនេះ: (a) អរបីតាល់ (b) degenerate

(c) វិធាន Hund ។

1.3 ចូរសង់ដើមឈើចំនួនកង់ទិចចំពោះចំនួនកង់ទិចមេ n = 4 ស្រដៀងទៅនឹងរូប1.15ដែល មាន n = 3

1.4 ចូរកំណត់តម្លៃ n ទាបបំផុតដែលតាមទ្រឹស្តី m_l អាចមានតម្លៃ +4 ។

1.5 ចូរកំណត់អរបីតាល់ដែលមាន n=5 និង l =1 ។

1.6 ចូរកំណត់អរបីតាល់ដែលមាន n=6 និង l =0 ។

1.7 តើចំនួនកង់ទិច n ទាក់ទងទៅនឹងលក្ខណៈនៃអរបីតាល់យ៉ាងដូចម្តេច?

1.8 តើចំនួនកង់ទិច l ទាក់ទងទៅនឹងលក្ខណៈនៃអរបីតាល់យ៉ាងដូចម្តេច?

1.9 ចូរពន្យល់ដោយសង្ខេបថាហេតុអ្វីបានជាកាបូនមានពីរអេឡិចត្រុងនៅក្នុងអរបីតាល់ p ពីរផ្សេងគ្នា ជាមួយនឹងស្ពីនស្របគ្នាជាជាងការរៀបចំផ្សេងទៀត?

1.10 ចូរពន្យល់ដោយសង្ខេបថាហេតុអ្វីបានជាបេរីល្យូមមានរូបសណ្ឋានអេឡិចត្រុងនៅសណ្ឋានគ្រឹះ $1s^2 2s^2$ ជាជាង $1s^2 2s^1 2p^1$?

1.11 ចូរសរសេររូបសណ្ឋានអេឡិចត្រុងនៅសណ្ឋានគ្រឹះដោយប្រើនិមិត្តសញ្ញាឧស្ម័នកំរសម្រាប់ អាតូម (a) សូដ្យូម (b) នីកែល (c) ទង់ដែង ។

1.12 ចូរសរសេររូបសណ្ឋានអេឡិចត្រុងនៅសណ្ឋានគ្រឹះដោយប្រើនិមិត្តសញ្ញាឧស្ម័នកំរសម្រាប់ អាតូម (a) កាល់ស្យូម (b) ក្រូម (c) សំណ ។

1.13 ចូរសរសេររូបសណ្ឋានអេឡិចត្រុងនៅសណ្ឋានគ្រឹះដោយប្រើនិមិត្តសញ្ញាឧស្ម័នកំរសម្រាប់ អ៊ីយ៉ុងនៃ (a) ប៉ូតាស្យូម (b)ស្កង់ស្យូម 3+ (c) ទង់ដែង 2+ ។

1.14 ចូរសរសេររូបសណ្ឋានអេឡិចត្រុងនៅសណ្ឋានគ្រឹះដោយប្រើនិមិត្តសញ្ញាឧស្ម័នកំរសម្រាប់ អ៊ីយ៉ុង នៃ (a) ក្លរ (b) កូបាល់ 2+ (c) ម៉ាញ៉េស្យូម 4+ ។

1.15 ចូរទស្សន៍ទាយបន្ទុកទូទៅនៃអ៊ីយ៉ុងតាល្យ៉ូម ។ ពន្យល់ហេតុផលរបស់អ្នកចំពោះរូប សណ្ឋានអេឡិចត្រុង ។

1.16 ចូរទស្សន៍ទាយបន្ទុកទូទៅនៃអ៊ីយ៉ុងសំណប៉ាហាំង ។ ពន្យល់ហេតុផលរបស់អ្នកចំពោះរូប សណ្ឋានអេឡិចត្រុង ។

1.17 ចូរទស្សន៍ទាយបន្ទុកទូទៅនៃអ៊ីយ៉ុងប្រាក់ ។ ពន្យល់ហេតុផលរបស់អ្នកចំពោះរូប សណ្ឋានអេឡិចត្រុង ។

1.18 ចូរទស្សន៍ទាយបន្ទុកខ្ពស់បំផុតដែលអាចមាននៃអ៊ីយ៉ុង zirconium ។ ពន្យល់ហេតុផលរបស់អ្នកចំពោះរូបសណ្ឋានអេឡិចត្រុង ។

1.19 ចូរប្រើដ្យាក្រាមស្រដៀងនឹងរូប 1.14 ដើម្បីកំណត់ចំនួនអេឡិចត្រុងសេរីនៅក្នុងអាតូម (a) អុកស៊ីសែន (b) ម៉ាញេស្យូម (c) ក្រូម ។

1.20 ចូរប្រើដ្យាក្រាមស្រដៀងនឹងរូប 1.14 ដើម្បីកំណត់ចំនួនអេឡិចត្រុងសេរីនៅក្នុងអាតូម (a) អាសូត (b) ស៊ីលីកូន (c) ដែក ។

1.21 ចូរសរសេររូបសណ្ឋានអេឡិចត្រុងដែលសង្ឃឹមចំពោះធាតុទី 113 និងរូបសណ្ឋានកាចុងពីរដែលអាចបង្កើតឡើង ។

1.22 តើអ៊ីយ៉ុងខាងក្រោមនេះមួយណាដូចអ៊ីដ្រូសែន?
(a) He^+ (b) He^- (c) Li^+ (d) Li^{2+}

1.23 អរបីតាល់បន្ទាប់ពី f គឺអរបីតាល់ g ។ តើអាចមានអរបីតាល់ g ប៉ុន្មាន? តើចំនួនកង់ទិចមេទាបបំផុត n ប៉ុន្មានដែលអាចមានអរបីតាល់ g ? ចូរស្រាវជ្រាវរកលេខអាតូមនៃធាតុដំបូងដែលអរបីតាល់ g អាច ចាប់ផ្តើមបំពេញលើមូលដ្ឋាននៃគំរូអរបីតាល់ d និង f ។

1.24 ចូរប្រើប្រាស់អត្ថបទគីមីរូបសម្រាប់ពតិមានបន្ថែមពីសមីការរលក Dirac និងភាពផ្ទុយគ្នារបស់វានឹងសមីការរលក Schrodinger ។

1.25 ចូរប្រើប្រាស់អត្ថបទគីមីរ៉ែជឿនលឿនជាប្រភពនៃពតិមានលើអរបីតាល់ f ។ តើលក្ខណៈទូទៅរបស់វាមានអ្វីខ្លះ? តើវាខុសគ្នាយ៉ាងដូចម្តេចក្នុងចំណោមខ្លួនវា?

1.26 នៅក្នុងផ្នែក 1.3 gadolinium ត្រូវបានរៀបរាប់ថាមានរូបសណ្ឋានអេឡិចត្រុងដែលងាកចេញពីអំបូរឡង់តានីត ។ តើធាតុមួយណានៅក្នុងអំបូរអាក់ទីនីតដែលអាចបង្ហាញការងាកចេញស្រដៀងគ្នានេះ? តើវាគួរមានរូបសណ្ឋានអេឡិចត្រុងយ៉ាងដូចម្តេច?

1.27 សំនួរទស្សនវិជ្ជាមួយសួរថា: តើអរបីតាល់មានឬទេបើសិនវាគ្មានអេឡិចត្រុង? ពិភាក្សា

ចម្លើយ

1.1 (a) ផ្ទៃដែលប្រូបាប៊ីលីតេអេឡិចត្រុងគឺស្មើសូន្យ ។

(b) មិនមានអេឡិចត្រុងពីរក្នុងអាតូមមួយអាចមានចំនួនកង់ទិចដូចគ្នា ។

(c) ប៉ារ៉ាម៉ាញេទិចជាទំនាញក្នុងដែនម៉ាញេទិចដោយអេឡិចត្រុងសេរី ។

1.5 5*p* ។

1.9 អេឡិចត្រុងពីរដាក់ជាគូ ហើយយកកន្លែងអរប៊ីតាល់ដូចគ្នាអាចមានទំនោរតិចជាង ព្រោះថាមពលដាក់ជាគូរអាចនឹងត្រូវការដើម្បីទប់ទល់នឹងកម្លាំងចម្រាន។ ដាក់ជាគូ ប៉ុន្តែក្នុងអរប៊ីតាល់ខុសគ្នាក៏ត្រូវការថាមពលច្រើនដែរ ព្រោះមានប្រូបាប៊ីលីតេកំណត់ ដែលអេឡិចត្រុងនឹងយកកន្លែងក្នុងមាឌលំហដូចគ្នា ដែលឱ្យផលជាកត្តាថាមពលចម្រាន។ បើមានស្ពីនស្រប មានប្រូបាប៊ីលីតេស្មើសូន្យ ដែលអេឡិចត្រុងយកលំហមាឌដូចគ្នា ដូចច្នេះ នេះជាមានល័ក្ខណ្ឌថាមពលទាបបំផុត។

1.13 (a) [Ar]; (b) [Ar]; (c) [Ar]$3d^9$.

1.17 1+។ ប្រាក់មានសណ្ឋានអេឡិចត្រុងគ្រឹះខាងក្នុង [Kr]$5s^14d^{10}$។ អេឡិចត្រុង $5s$ ត្រូវបាត់បង់មុនដែលផ្តល់នូវអ៊ីយ៉ុងបន្ទុក 1+ ។

1.21 សណ្ឋានអេឡិចត្រុងនៃអាតូម: [Rn]$7s^25f^{14}6d^{10}7p^1$.

សណ្ឋានអេឡិចត្រុងនៃអ៊ីយ៉ុង +1: [Rn]$7s^25f^{14}6d^{10}$.

សណ្ឋានអេឡិចត្រុងនៃអ៊ីយ៉ុង +3: [Rn]$5f^{14}6d^{10}7p$.

1.25 មានអរប៊ីតាល់ f ចំនួនប្រាំពីរ។ គេមានវិធីពីរយ៉ាងតិចនៃការពណ៌នាពួកវា និងការកំណត់សម្គាល់ពួកវា គឺក្រុមធម្មតា និងក្រុមគូប។ ដំណោះស្រាយចំនួនប្រាំពីរសម្រាប់ក្រុមគូបគឺ: x^3, y^3, z^3, xyz, $z(x^2-y^2)$, $y(z^2-x^2)$, និង $x(z^2-y^2)$។ f_{x3}, f_{y3}, f_{z3} ដូចទៅនឹង d_{z2} ដែលក្នុងនោះពួកវាមានឡូបនៅលើអ័ក្សអាប់ស៊ីស ប៉ុន្តែជាមួយវង់រាងមូល "doughnut" ពីរជុំវិញចំណុចកណ្តាលជាជាងវង់តែមួយ។ អ័រប៊ីតាល់ f ផ្សេងទៀតដូចទៅនឹង អរប៊ីតាល់ d_{x2-y2}, d_{xy}, d_{xz}, និង d_{yz} ដែលក្នុងនោះពួកវាមានឡូបចំនួនប្រាំបី(មិនមែនជាបួន)នៅចន្លោះអ័ក្ស។ អត្ថបទជាច្រើនដូចជាអត្ថបទសរសេរដោយ Huheey, រៀបរាប់ពីអរប៊ីតាល់ f។ យើងក៏អាចមើលផងដែរនូវ E.A. Ogryzlo, លើទំរង់នៃអរប៊ីតាល់ f ដោយ *J. Chem. Educ.* **42** (1965): 150–151 (1965) និងឯកសារខាងក្នុង។